

SERIE : B
N° D'ORDRE : 57
N° DE SERIE : 49

THESE

présentée devant

L'UNIVERSITE DE RENNES

U.E.R. STRUCTURE ET PROPRIETES DE LA MATIERE

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR-INGENIEUR

EN SCIENCES PHYSIQUES

par

Daniel LEMOINE

CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA CONDUCTION ELECTRONIQUE
DANS L'ARSENIURE DE GALLIUM AUX BASSES TEMPERATURES.

Soutenue le 14 Novembre 1975 devant la Commission d'Examen

M. J. MEINNEL

Président

M. M. BROUSSEAU

M. Y. COLIN

M. R. GRANGER

M. C. PELLETIER

M. S. ROLLAND

} Examineurs

SERIE : B
N° D'ORDRE : 57
N° DE SERIE : 49

THESE

présentée devant

L'UNIVERSITE DE RENNES

U.E.R. STRUCTURE ET PROPRIETES DE LA MATIERE

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR-INGENIEUR

EN SCIENCES PHYSIQUES

par

Daniel LEMOINE

CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA CONDUCTION ELECTRONIQUE
DANS L'ARSENIURE DE GALLIUM AUX BASSES TEMPERATURES.

Soutenue le 14 Novembre 1975 devant la Commission d'Examen

M. J. MEINNEL

Président

M. M. BROUSSEAU

M. Y. COLIN

M. R. GRANGER

M. C. PELLETIER

M. S. ROLLAND

} Examineurs

UNIVERSITE DE RENNES

U.E.R. SCIENCES ET PHILOSOPHIE

Doyens Honoraires

M. MILON Y.
M. TREHIN R.
M. SCHMITT M.
M. LE MOAL H.
M. MARTIN Y.
M. BOCLE J.

Professeurs Honoraires

M. FREYMANN R.
M. HAGENE P.
M. ROHMER R.
M. TREHIN R.
M. SALMON - LEGAGNEUR F.
M. des ABBAYES H.
M. MILON Y.

Maîtres de Conférences Honoraires

M. GRILLET L.
M. LECRECO A.

Mathématiques

Professeurs

M. GUERINDON Jean
M. METIVIER Michel
M. GIORGIUTTI Italo
M. TOUGERON Jean-Claude
M. MIGNOT Alain
M. HOUDEBINE Jean
M. KEANE Michaël
M. BOULAYE Guy

Maîtres de Conférences & Chargés de Cours

M. BERTHELOT Pierre
M. BREEN Lawrence
M. CAMUS Jacques
M. CONZE Pierre
M. FERRAND Daniel
M. GUIVARC'H Yves
M. LE GOUPIL Jean
M. LERMAN Israël
M. NEDELEC Jean-Claude
M. TRILLING Laurent
M. VERJUS Jean-Pierre

Physique

M. VACHER Michel
M. VIGNERON Léopold
M. LE BOT Jean
Mme ROBIN née SALOMOND
M. ROBIN Stéphane
M. LE MONTAGNER Serge
M. MEVEL Jean-Yves
M. MEINNEL Jean
M. REGENSTREIF Edouard
M. BRUN Pierre
M. LE ROUX Emile
M. DUBOST Gérard
M. ARQUES Pierre-Yves
M. HAEUSLER Claude
M. NUSIMOVICI Michel

M. GUIDINI J.
M. DECAMPS E.A.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

Professeurs

Maîtres de Conférences & Chargés de Cours

Chimie

M. VENE Jean
M. LE MOAL Henri
M. LEVAS E.
M. PELTIER Daniel
M. PRIGENT J.
M. FOUCAUD André
M. LANG Jean
M. CARRIE R.
M. GUERILLOT Claude-Roger
M. KERFANTO Michel (E.N.S.C.R.)
M. DABARD René
M. GRANDJEAN Daniel
M. LUCAS Jacques
M. MARTIN Guy

M. TALLEC André

Chimie Biologique

M. JOUAN Pierre
M. DUVAL Jacques

Géologie

M. COGNE Jean
Mlle DURAND Suzanne
M. BOILLLOT Gilbert

M. HAMEURT Jean-Marie
M. LARDEUX Hubert

Zoologie

M. RICHARD Gaston
M. MAILLET Pierre
M. RAZET Pierre
M. FOLLIOT Roger
M. ALLEGRET Paul
M. MANIEY Jacques
M. JOLY Jean-Marie
M. LEFEUVRE J.C.

M. CALLEC Jean-Jacques

Botanique

M. VILLERET Serge
M. CLAUSTRES Georges
Mlle GOAS Gabrielle
Mlle GOAS Marie
Mme LEMOINE Cécile

M. TOUFFET Jean

Philosophie

M. ORTIGUES Edmond

M. JACQUES Francis
M. BEYSSADE Jean-Marie

Cette étude a été réalisée au Département de Physique de l'INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUEES de RENNES sous la direction de Messieurs les Professeurs R. GRANGER, C. PELLETIER et S. ROLLAND. Je tiens à leur exprimer ma profonde gratitude pour leur aide constante et leurs nombreux conseils.

Le début de ce travail a bénéficié de la collaboration de Monsieur A. RABOUTOU que je remercie.

Je suis très reconnaissant à Monsieur le Professeur J. MEINNEL d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse ainsi qu'aux Professeurs M. BROUSSEAU et Y. COLIN qui ont bien voulu prendre connaissance de ce travail et le juger.

Je sais gré à Monsieur J.P. BOULET du C.N.E.T. LANNION pour l'aide qu'il m'a accordée lors des mesures d'épaisseur des couches épitaxiées.

J'exprime également mes remerciements à tous ceux qui ont contribué à l'aboutissement de cette étude, en particulier à Madame M.T. JULLIERE et Mademoiselle D. ROGER, Secrétaires, Messieurs J.C. CHEROT et M. DAUNAY, Dessinateurs, Monsieur H. GUERIN, Photographe, Messieurs R. DOUESNARD et A. JARRYL, Imprimeurs qui ont participé à la réalisation pratique de ce mémoire.

SOMMAIRE

	<i>Pages</i>
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I CONDUCTION ELECTRONIQUE DANS GaAs : NOTIONS THEORIQUES	
I - 1 - CARACTERISTIQUES PRINCIPALES DE GaAs.....	3
I-1-1- Propriétés du cristal.....	3
I-1-2- Structure de bande.....	4
I - 2 - PHENOMENES DE CONDUCTION.....	7
I-2-1- Différents régimes de conduction.....	7
I-2-2- Niveaux d'énergie introduits par les impuretés	10
I-2-3- Equation de neutralité.....	14
I-2-4- Equation de transport.....	16
I - 3 - MECANISMES DE DIFFUSION DES ELECTRONS LIBRES.....	21
I-3-1- Modes acoustiques non polaires.....	23
I-3-2- Modes acoustiques polaires.....	26
I-3-3- Processus UMKLAPP.....	26
I-3-4- Modes optiques non polaires.....	28
I-3-5- Modes optiques polaires.....	28
I-3-6- Diffusion par les impuretés ionisées.....	29
I-3-7- Diffusion par les impuretés neutres.....	34
I-3-8- Processus de diffusion dipolaire.....	35
I-3-9- Processus de diffusion moléculaire.....	37
I-3-10- Collisions interélectroniques.....	37
I - 4 - CONDUCTION PAR IMPURETES.....	40
I-4-1- Expression de ρ_3 en fonction de la concentration N_D	41
I-4-2- Expression de ρ_3 en fonction du champ magnétique appliqué.....	46
I-4-3- Expression de l'énergie d'activation ϵ_3	47

CHAPITRE II

ETUDE EXPERIMENTALE

II - 1 -	PRINCIPE DE LA MESURE : METHODE DE VAN DER PAUW.....	51
II - 2 -	ELABORATION DES ECHANTILLONS.....	53
	II-2-1- Préparation des couches.....	53
	II-2-2- Réalisation des contacts ohmiques.....	53
	II-2-3- Sélection des échantillons.....	57
II - 3 -	DISPOSITIF EXPERIMENTAL.....	58
	II-3-1- Le porte-échantillon.....	58
	II-3-2- L'appareillage cryogénique.....	60
II - 4 -	RESULTATS DES MESURES.....	64
	II-4-1- Thermalisation de la distribution électronique	64
	II-4-2- Mode opératoire.....	64
	II-4-3- Résultats obtenus.....	65

CHAPITRE III

ANALYSE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

III - 1 -	CARACTERISATION DES ECHANTILLONS.....	72
	III-1-1- Principe de l'analyse.....	72
	III-1-2- Exploitation numérique.....	77
	III-1-3- Résultats obtenus.....	80
III - 2 -	DISCUSSION DES RESULTATS CONCERNANT LA CONDUCTION PAR ELECTRONS LIBRES.....	83
	III-2-1- Discussion concernant la mobilité.....	83
	III-2-2- Variations du facteur de diffusion r_H	89
III - 3 -	DOMAINE DE CONDUCTION GOUVERNE PAR LE MECANISME "HOPPING"	93
	III-3-1- Dépendance de ρ_3 avec la concentration N_D	93
	III-3-2- Dépendance de ρ_3 avec le champ magnétique....	96
	III-3-3- Dépendance de ϵ_3 avec la concentration N_D	98
III - 4 -	RESULTATS RELATIFS AU DOMAINE DE CONDUCTION "MIXTE".....	99
	III-4-1- Estimation de la mobilité de conduction des électrons libres.....	99
	III-4-2- Tentative d'analyse utilisant une description à deux types de porteurs.....	103
CONCLUSION.....		108

INTRODUCTION

Durant ces quinze dernières années, de nombreux travaux ont été consacrés à GaAs et l'intérêt technologique de ce matériau a stimulé les efforts concernant sa préparation et le contrôle de son dopage. Il est ainsi possible d'obtenir actuellement ce semi-conducteur sous forme de monocristaux très purs en particulier lorsqu'ils sont réalisés par croissance cristalline épitaxiale. Les phénomènes de transport et les propriétés optiques ont été l'objet d'études multiples qui permettent maintenant de connaître avec une bonne précision la plupart des paramètres caractérisant ce matériau. Un des avantages de ce semi-conducteur par rapport à l'étude des propriétés de transport des électrons aux faibles champs électriques est que sa bande de conduction au voisinage du minimum soit bien décrite par la classique "bande parabolique sphérique" alors que pour beaucoup d'autres semi-conducteurs, cette bande n'est pas aussi simple.

Jusqu'à présent, le dépouillement des résultats expérimentaux concernant la conduction dans GaAs aux basses températures a été réalisé d'une manière qui paraît assez approchée. En effet, le facteur de diffusion a toujours été pris égal à 1 alors que dans le domaine de températures où la dispersion est due principalement aux impuretés ionisées, il peut dépasser, d'après les estimations théoriques, la valeur de 1,5 et varie avec la température.

Partant de mesures électriques soignées, il a été possible de décrire les résultats expérimentaux en tenant compte de tous les mécanismes de dispersion efficaces et en déterminant la valeur du coefficient de diffusion en fonction de la température et pour chaque échantillon. Cette analyse ayant permis de caractériser avec précision chacun des échantillons, nous avons pu confronter les résultats expérimentaux concernant la conduction par saut ("hopping") qui a été mise en évidence aux très basses températures, aux approches théoriques actuelles.

Ainsi, nous rappelons au chapitre I les résultats théoriques relatifs aux différents processus de diffusion des électrons libres et la description du mécanisme "hopping". Au chapitre II sont présentés le mode de préparation et la sélection des échantillons étudiés, le dispositif expérimental et les résultats de mesure obtenus. Nous exposons au chapitre III le principe et la mise en oeuvre du calcul numérique concernant la conduction par les électrons libres dont les résultats sont confrontés avec les valeurs des données expérimentales. Les concentrations en impuretés ainsi déterminées pour chaque échantillon permettent ensuite l'analyse des résultats concernant la conduction "hopping".

Les relations reportées dans ce mémoire, sont exprimées dans le système d'unités c.g.s. u.e.s. utilisé habituellement dans le domaine des semi-conducteurs.

CHAPITRE I

CONDUCTION ELECTRONIQUE DANS GaAs

NOTIONS THEORIQUES

I - 1 - CARACTERISTIQUES PRINCIPALES DE GaAs

I-1-1- Propriétés du cristal

L'Arséniure de gallium GaAs est un composé semi-conducteur III-V de structure cristalline du type "blende de zinc" (groupe ponctuel $\bar{4} 3 m$). Son réseau peut être considéré comme la superposition de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre de $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$. (cf. fig. I.1). La cellule unité est constituée d'un atome de gallium et d'un atome d'arsenic ; la figure I.1 montre qu'aucun atome n'est centre d'inversion du cristal.

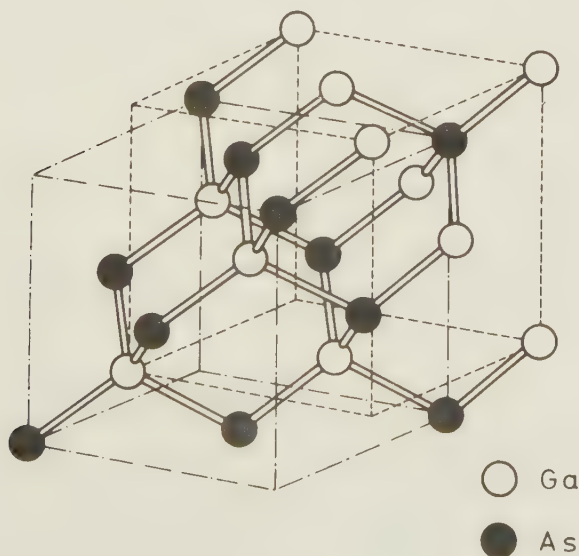


FIG. I.1 Structure cristalline de GaAs.

L'arsenic possède cinq électrons sur sa "couche" électronique extérieure alors que le gallium n'en dispose que de trois. Dans le cristal, chaque atome effectue quatre liaisons avec ses plus proches voisins. Cette liaison entre les atomes d'arsenic et de gallium est intermédiaire entre le type purement ionique et le type purement covalent : dans le premier cas, la distribution de charge est très dense au voisinage proche des atomes alors que pour une liaison covalente les électrons se trouvent répartis uniformément entre les atomes. La figure I.2 permet d'apprécier l'ionocité d'un certain nombre de composés III-V : le degré d'ionocité de liaison λ est égal à 1 lorsque la liaison est purement covalente et est nul lorsqu'elle est totalement ionique.

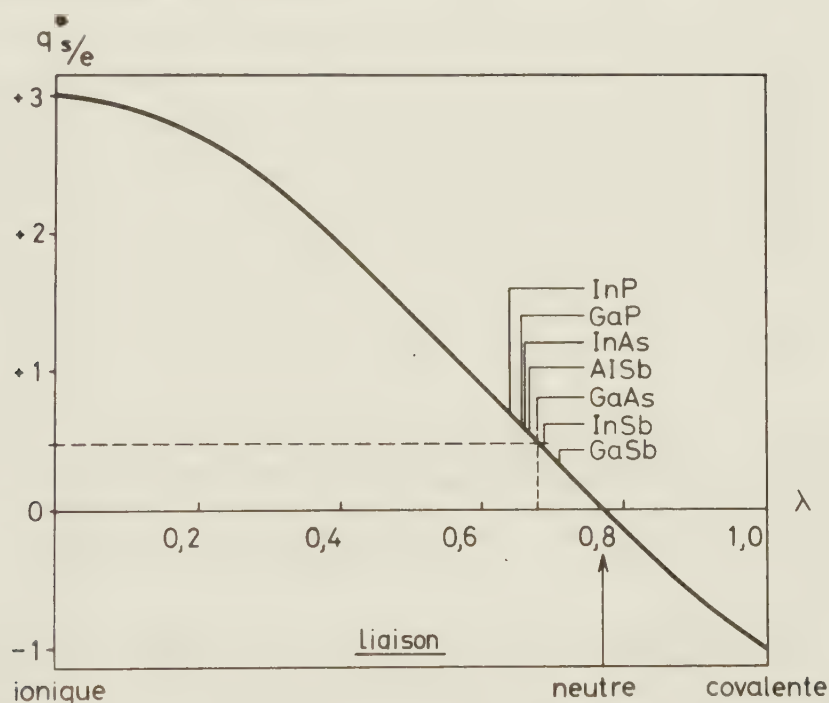


FIG. I.2 Relation entre la charge effective de SZIGETI (q_s^*) et le degré d'ionocité de liaison λ pour différents composés III-V (d'après HILSUM (1))

I-1-2- Structure de bande

A la suite des prévisions de HERMAN (2) sur la structure de bande de GaAs, CALLAWAY (3) montra que le minimum de la bande de conduction se trouvait au centre de la zone de BRILLOUIN. Il suggéra également que la valeur de la masse effective à l'extrémum de cette bande devait être faible.

Les principaux paramètres de la structure de bande de GaAs furent déterminés par EHRENREICH (4), (5) qui donna les valeurs des différentes masses effectives aux extréma et celle de la largeur ϵ_G de la bande interdite ainsi que sa variation en fonction de la température :

$$\epsilon_G(\text{eV}) = 1,53 - 4,9 \cdot 10^{-4} \cdot T(\text{K}) \quad (\text{I.1.1})$$

Une bande secondaire multivallée fut trouvée ayant ses minima situés à 0,36 eV au-dessus de celui de la bande de conduction principale dans les directions équivalentes à [100]. La figure I.3 résume le schéma énergétique avec mention des valeurs des différentes masses effectives. EHRENREICH (4) précise en outre que les effets de non-parabolicité sont très peu importants au bas de la bande de conduction de GaAs. Une étude de la relation $\epsilon(k)$ a été effectuée par STEVENS et YEE (6) : ils montrèrent qu'à température ambiante et pour des échantillons de GaAs très dopés (entre 10^{18} et 10^{19} atomes d'impuretés par cm^3) la non-parabolicité des bandes $\epsilon(k)$ se représentait par la loi :

$$|\vec{k}|^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} \cdot (\epsilon + \alpha \epsilon^2) \quad (\text{I.1.2})$$

dans laquelle l'énergie ϵ et le vecteur d'onde $\vec{k}$ sont comptés à partir du minimum de la bande de conduction, pour lequel la masse effective est désignée par m^* ; le coefficient α possède une valeur de $0,658 (\text{eV})^{-1}$ dans le cas de GaAs.

Notre travail ayant été réalisé avec des échantillons peu dopés (de l'ordre de 10^{14} à 10^{15} atomes d'impuretés par cm^3) étudiés à champ faible et principalement aux basses températures, nous pouvons négliger ces effets de non-parabolicité et considérer dans tous les cas les surfaces à énergie constante sphériques.

De nouvelles valeurs de la masse effective à l'extrémum de la bande de conduction ont été obtenues par différentes méthodes depuis la détermination par EHRENREICH : citons entre autres les travaux de STILLMAN et coll.(7) qui, par spectroscopie infrarouge sous champ magnétique, trouvèrent une valeur de $m^* = (0,0665 \pm 0,0005) \cdot m$, à quelques degrés KELVIN.

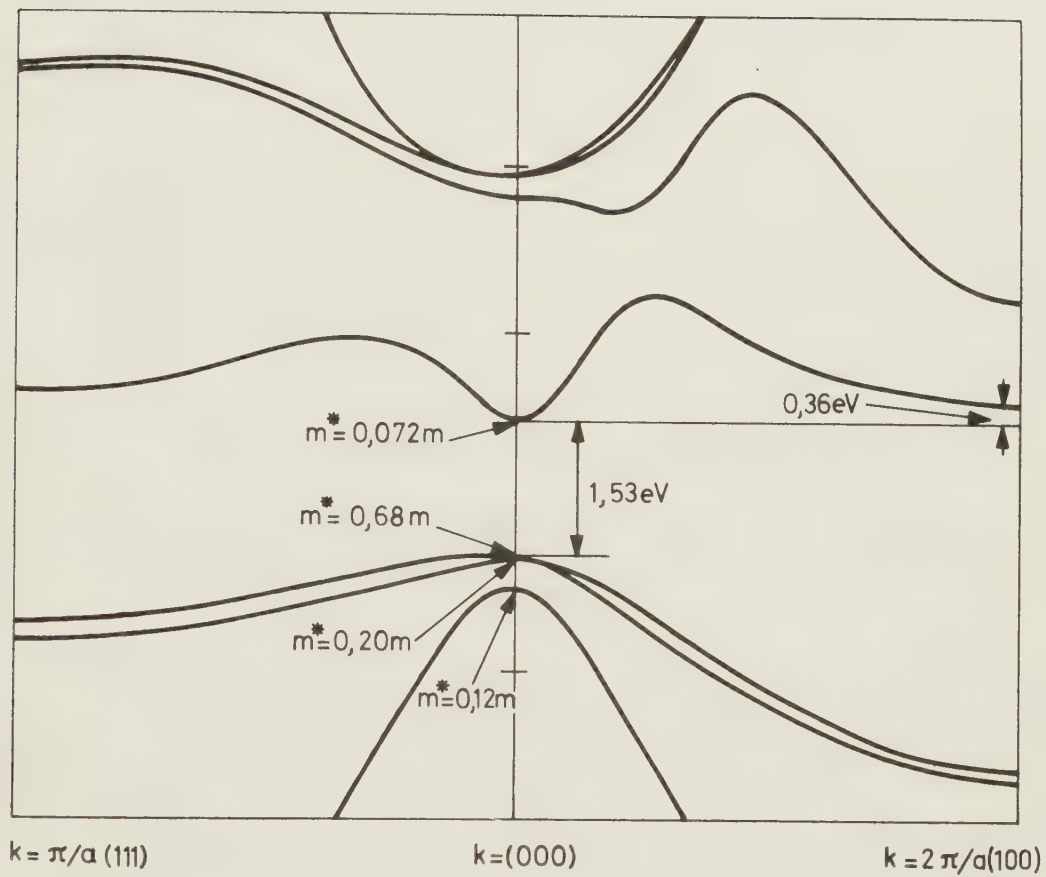


FIG. I.3 Structure de bande de GaAs.

(Les valeurs mentionnées sont celles données par EHRENREICH (4))

L'observation de l'effet magnétophonon dans la magnéto-résistance d'échantillons de GaAs a permis à STRADLING et WOOD (8) de donner la variation de la masse effective en fonction de la température (Cf. fig. I.4).

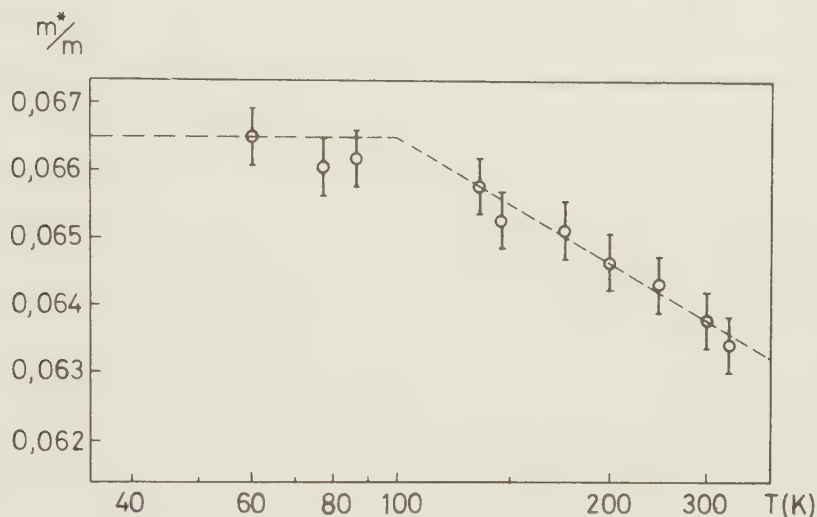


FIG. I.4 Variation de la masse effective dans GaAs avec la température déduite de mesures magnétophonon (d'après STRADLING et WOOD (8))

Ces résultats furent confirmés par HERLACH (9) qui détermina, par l'analyse d'expériences de résonance cyclotron, les valeurs à 10K et à 300K, égales respectivement à 0,0665.m et à 0,0626.m.

La figure I.4 montre que la valeur de la masse effective m^* est pratiquement constante au-dessous de 100K environ, alors qu'elle décroît légèrement au-dessus de 100K : étudiant les effets de transport dans le domaine de température 1,5K - 70K, nous prendrons donc une valeur de masse effective constante et égale à 0,0665.m.

I - 2 - PHENOMENES DE CONDUCTION

I-2-1- Différents régimes de conduction

Un matériau semi-conducteur n'est jamais d'une pureté totale et contient des atomes étrangers, généralement en position de substitution dans le réseau. Lorsqu'un tel atome d'impureté a un électron en plus de ceux nécessaires à la réalisation des liaisons avec ses plus proches

voisins, il se comporte comme donneur : l'électron "excédentaire" et l'ion d'impureté forment ensemble un système hydrogénoïde. Une excitation de faible énergie permet de libérer cet électron et de le rendre libre dans le cristal. le niveau d'énergie de l'électron sur un tel site donneur est donc légèrement en dessous de l'extrémum de la bande de conduction. Lorsqu'il manque au contraire un électron à un centre d'impureté pour réaliser l'ensemble de ses liaisons, ce centre peut retenir un électron du cristal afin de stabiliser sa configuration électronique : dans ce cas, il est dit accepteur et le niveau d'énergie de l'électron capté est légèrement au-dessus du maximum de la bande de valence. On constate donc que dans le domaine des basses températures, un matériau ayant des concentrations en centres donneurs N_D et en centres accepteurs N_A pour lesquelles $N_D > N_A$ (type n), possède tous ses atomes accepteurs ionisés. Dans le cas contraire, c'est-à-dire pour $N_A > N_D$ (type p), ce sont les sites donneurs qui se trouvent tous dépourvus de leur électron "excédentaire".

Nous nous bornerons dans la suite à la description d'un semi-conducteur de type n ($N_D > N_A$), ce qui est le cas des échantillons étudiés.

Plusieurs mécanismes de conduction peuvent intervenir dans un semi-conducteur, leur importance relative dépendant de la température. On distingue les trois régimes suivants :

- Conduction par impuretés

Aux très basses températures, il y a peu d'électrons libres dans la bande de conduction. La majeure partie du courant résultant d'une force extérieure provient d'un transfert d'électrons entre centres donneurs. Pour une faible concentration de ces centres donneurs, le recouvrement des fonctions d'onde de sites voisins est très faible et les "sauts" d'électrons entre les centres donneurs sont thermiquement activés avec une énergie dénommée généralement ϵ_3 dans la littérature : on désigne habituellement ce type de transport de charges par le terme de "conduction par saut" ou "hopping". Par contre, lorsque le matériau est fortement dopé en éléments donneurs et que $N_D \gg N_A$, les états donneurs forment alors une bande dans laquelle la conduction est du type métallique, c'est-à-dire sans activation thermique.

- Régime extrinsèque

Les électrons restant sur les sites donneurs peuvent être activés thermiquement dans la bande de conduction où leur densité croît avec la température. Quand l'énergie thermique dépasse la différence d'énergie entre le niveau donneur et l'extrémum de la bande de conduction, l'ionisation des donneurs est quasi-totale et la densité en électrons libres se sature alors à la valeur $N_D - N_A$ quand la température croît. L'énergie d'ionisation des donneurs dans GaAs étant de quelques meV, la saturation a lieu vers 100K.

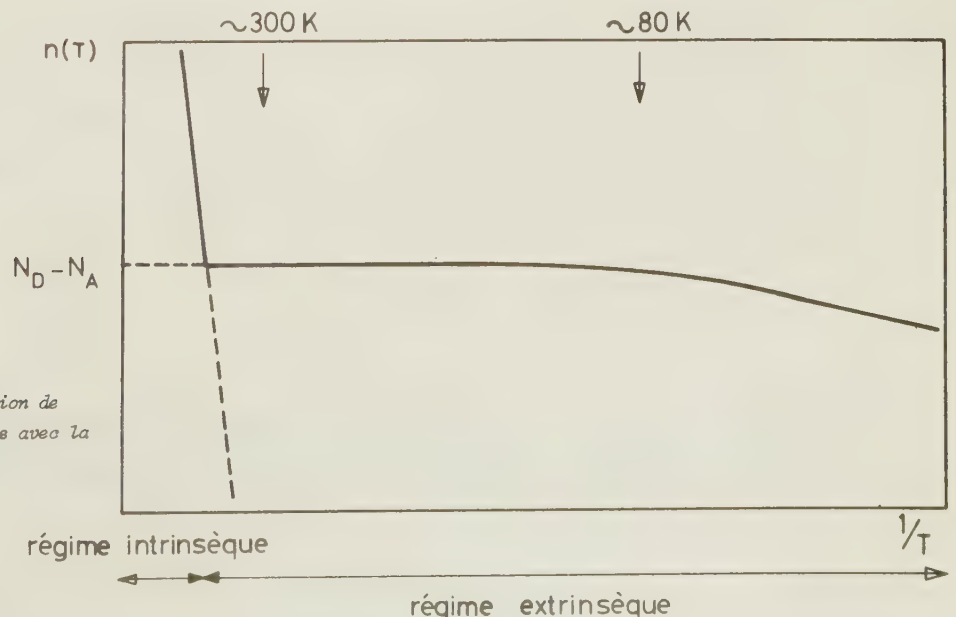
Aux basses températures la contribution due au mécanisme "hopping" est d'autant plus importante par rapport à celle due aux électrons extrinsèques qu'un semi-conducteur est plus dopé. Le mécanisme "hopping" se fait sentir à plus faible température pour les échantillons purs (Cf. fig II.9)

- Régime intrinsèque

Lorsque la température s'élève, de plus en plus d'électrons sont thermiquement activés de la bande de valence dans la bande de conduction. La largeur de la bande interdite de GaAs étant de 1,40 eV à 300K (Cf. relation I.1.1), il y a moins de 10^7 cm^{-3} électrons "intrinsèques" dans la bande de conduction : en comparant aux 10^{14} ou 10^{15} électrons libres provenant du niveau donneur (Cf. tableau II.2), on peut donc négliger la concentration d'électrons provenant de la bande de valence par rapport à ceux provenant du niveau donneur : le matériau est encore en régime extrinsèque à 300K.

La figure I.5 rappelle le schéma de variation de la concentration en porteurs libres en fonction de la température, en indiquant les influences relatives des deux régimes intrinsèque et extrinsèque.

FIG. I.5 Allure schématique de la variation de concentration en porteurs libres avec la température



I-2-2- Niveaux d'énergie introduits par les impuretés

Les atomes d'impuretés présents dans le cristal introduisent des niveaux d'énergie à l'intérieur de la bande interdite du semi-conducteur. Pour une dilution importante des centres d'impuretés, le modèle de l'atome hydrogénoïde situé dans un milieu de constante diélectrique statique κ est une bonne approche du problème et permet de déterminer les niveaux électro-
niques fondamentaux et excités. L'électron "excédentaire" d'un atome donneur en site substitutionnel voit le potentiel périodique du réseau cristallin $V(r)$ auquel s'ajoute le potentiel créé par l'ion donneur s'exprimant par $V'(r) = -\frac{e^2}{\kappa \cdot r}$. L'équation de SCHRODINGER correspondante s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + V'(r) \right] \cdot \psi = \epsilon \cdot \psi \quad (I.2.1)$$

Dans l'approximation de la masse effective, l'effet du potentiel périodique $V(r)$ est traduit par une modification de la masse m de l'électron. L'équation (I.2.1) s'exprime alors par :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V'(r) \right] \cdot \psi = \epsilon \cdot \psi \quad (I.2.2)$$

où m^* représente la masse effective de l'électron libre dans le cristal.

Les valeurs propres de l'énergie, solutions de cette équation, sont données par la relation :

$$\epsilon_{\ell} = -\frac{1}{\ell^2} \cdot \frac{e^4 \cdot m^*}{2\hbar^2 \cdot \kappa^2} = -\frac{1}{2\ell^2} \cdot \frac{e^2}{\kappa \cdot a_0^*} \quad (I.2.3)$$

dans laquelle ℓ est un nombre entier, l'origine des énergies étant prise à l'extrêmu de la bande de conduction. Le terme $\frac{\hbar^2}{m \cdot e^2}$ est le rayon de BOHR a_0 de l'atome d'hydrogène et vaut 0,529 Å ; le rayon de BOHR a_0^* d'un atome hydrogénoïde dans GaAs est $a_0 \cdot \left(\frac{m}{m^*}\right) \cdot \kappa$, soit 99,7 Å en prenant pour valeur de la constante diélectrique $\kappa = 12,53$ (27). Les niveaux sont définis par :

$$\epsilon_{\ell} = -\frac{5,76}{\ell^2} \text{ meV} \quad (I.2.4)$$

Cette description fut en bon accord avec les premières analyses de conductivité électrique et de mesures de HALL parmi lesquelles on peut

citer BOLGER et coll. (10) et EDDOLLS (11). En 1969, des expériences de photoconductivité extrinsèque en infrarouge lointain permirent de définir avec précision le spectre des niveaux d'énergie : STILLMANN et coll. (7) obtinrent une énergie d'ionisation ϵ_I de $-5,86 \pm 0,02$ meV dans le cas de GaAs très pur de type n. Ils vérifièrent également que la position énergétique des états excités suivait la relation :

$$\epsilon_\ell = \frac{1}{\ell^2} \cdot \epsilon_I \quad (I.2.5)$$

Pour une très faible concentration N_D , chaque état d'énergie donneur est formé d'un niveau discret mais N_D fois dégénéré. Les fonctions d'onde correspondant à chaque niveau, se recouvrent de plus en plus lorsque la concentration N_D augmente. La dégénérescence disparaît alors et chaque niveau s'élargit en une bande. Pour une concentration donnée, le recouvrement des fonctions d'onde est d'autant plus important qu'elles correspondent à un niveau d'indice ℓ plus élevé : il y a alors formation d'un quasi-continuum de largeur $\Delta\epsilon$ placé sous l'extrêmu de la bande de conduction et prolongeant celle-ci (12). L'énergie d'activation thermique ϵ_D des électrons situés sur le niveau fondamental se trouve ainsi reliée à l'énergie d'ionisation ϵ_I par l'expression : (Cf. fig. I.6.a)

$$\epsilon_I = \epsilon_D + \Delta\epsilon \quad (I.2.6)$$

La figure I.6.b montre en particulier la variation expérimentale de l'énergie ϵ_D en fonction de la concentration N_D en éléments donneurs et situe les énergies des niveaux calculés à partir du modèle hydrogénoïde.

Une description plus systématique proposée par DEBYE et CONWELL (13), tient compte en particulier des trois effets suivants :

- variation de l'extrémité de la bande de conduction due à l'attraction des électrons de conduction par les donneurs ionisés, la distribution aléatoire de ces centres entraînant un abaissement moyen mais également une fluctuation spatiale de la position en énergie de l'extrêmu.

- modification de la position du niveau donneur fondamental due à l'écrantage par les électrons de conduction.

- accroissement de la constante diélectrique dû à la présence des atomes donneurs neutres polarisables.

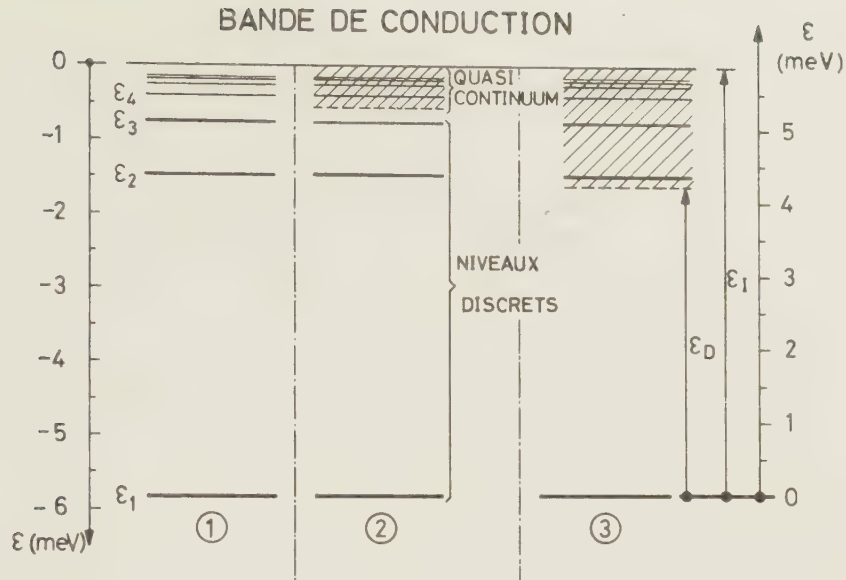


FIG. I.6.a Schéma des niveaux d'énergie dans GaAs de type n.

1. cas limite d'un seul atome donneur dans le cristal montrant les niveaux fondamental et excités.
2. cas d'une faible concentration en atomes donneurs où le quasicontinuum recouvre une partie des états excités.
3. cas d'une concentration en atomes donneurs plus importante où le quasicontinuum contient l'ensemble des états excités.

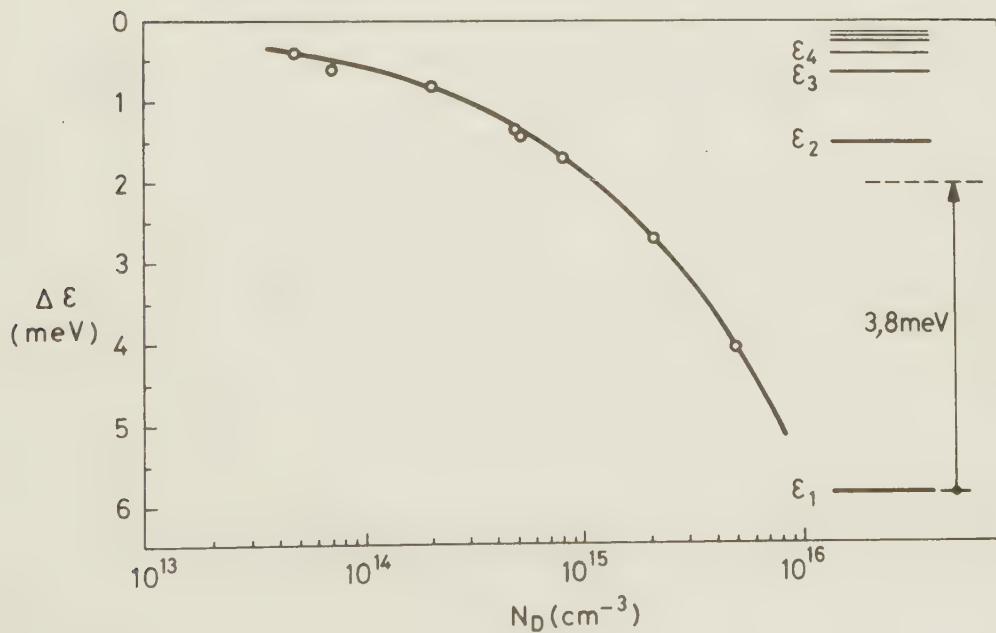


FIG. I.6.b Variation expérimentale de la largeur $\Delta \epsilon$ du quasicontinuum en fonction de la concentration en atomes donneurs (d'après STILLMANN et coll. [12]). Le niveau d'énergie fondamental et les premiers niveaux excités sont également représentés.

LEE et Mc GILL (14) ont repris ce problème et ont montré que, seule, la première considération pouvait entraîner une variation non négligeable du niveau donneur de base par rapport à l'extrêmu de la bande de conduction dans le cas de fortes concentrations en impuretés. Ces mêmes auteurs ont également déterminé l'élargissement du niveau donneur fondamental résultant de la dilution finie et de la répartition aléatoire des impuretés. Ils obtiennent pour un cristal de silicium très dopé (10^{18} donneurs par cm^3) un élargissement du niveau fondamental de l'ordre de 30 meV, c'est-à-dire légèrement inférieur à l'énergie d'ionisation de ce niveau.

Dans le cas de GaAs faiblement dopé (10^{15} donneurs par cm^3), une estimation de cet élargissement nous est fournie par l'étude de BALTENSBERGER (15) : la figure I.7 montre la variation calculée de $\frac{\epsilon}{e^2/2a_0^*}$ en fonction du paramètre sans dimension $\frac{r_D}{a_0^*}$, a_0^* étant le rayon de BOHR de l'impureté dans le cristal et r_D la demi-distance moyenne entre sites donneurs, déterminée par $r_D = \left(\frac{3}{4\pi N_D}\right)^{1/3}$.

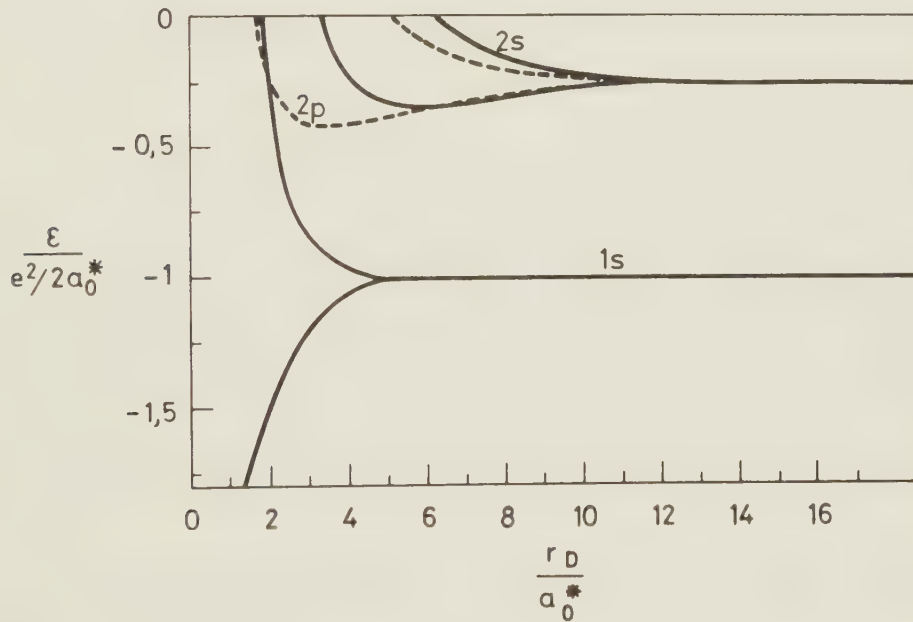


FIG. I.7 Elargissement des niveaux donneurs en fonction de la demi-distance entre atomes donneurs (d'après BALTENSBERGER (15))

En considérant un cristal de GaAs contenant 10^{15} atomes donneurs par cm^3 , ce qui est une valeur maximum pour les échantillons étudiés, nous obtenons un rapport $\frac{r_D}{a_0^*}$ égal à 6,2 : la figure I.7 montre que l'élargissement du niveau fondamental est alors négligeable. A partir de cette même figure, la concentration limite pour laquelle l'énergie d'activation ϵ_D devient nulle est $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ correspondant à $\frac{r_D}{a_0^*} \approx 2$: cette valeur est en assez bon accord avec les diverses déterminations expérimentales qui ont donné des concentrations limites allant de $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ à 10^{16} cm^{-3} (Cf. [11] et figure I.6.b).

I-2-3- Equation de neutralité

A une température donnée, il y a $n(T)$ des électrons apportés par les éléments donneurs qui se trouvent dans la bande de conduction, le complément restant localisé sur les niveaux fondamental et excités des atomes donneurs.

La concentration en électrons libres dans la bande de conduction s'exprime par :

$$n(T) = \int_0^{\infty} g_c(\epsilon) \cdot f_o(\epsilon) \cdot d\epsilon \quad (\text{I.2.7})$$

où $g_c(\epsilon)$ est la densité d'états de la bande de conduction,

$$f_o(\epsilon) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \epsilon_F}{k_B T}\right)}$$

représente la fonction de distribution des électrons à l'équilibre thermodynamique, ϵ_F étant le niveau de FERMI,

et la référence des énergies étant prise à l'extrêmu de la bande de conduction.

La concentration en électrons situés sur un niveau donneur défini par l'indice ℓ s'écrit [16] :

$$N_{\ell}(T) = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{\beta_{\ell}} \cdot \exp\left(\frac{\epsilon_{\ell} - \epsilon_F}{k_B T}\right)} \quad (\text{I.2.8})$$

où β_{ℓ} est le facteur de dégénérescence du niveau ℓ .

L'équation de neutralité électrique dans le cristal s'écrit, en régime extrinsèque :

$$N_A + n(T) = N_D - \sum_{\ell} N_{\ell}(T) \quad (\text{I.2.9})$$

la sommation s'effectuant jusqu'au dernier niveau excité non inclus dans le quasi-continuum.

En considérant que la bande de conduction est parabolique, et que le semi-conducteur n'est pas dégénéré, EDDOLLS (11) exprime l'équation (I.2.9) sous la forme suivante :

$$\frac{n(T) [N_A + n(T)]}{[N_D - N_A - n(T)]} = \frac{N_c}{\sum_{\ell} \frac{1}{\beta_{\ell}} \exp \left(\frac{\epsilon_{\ell} - \epsilon_F}{k_B T} \right)} \quad (\text{I.2.10})$$

$$\text{où } N_c = 2 \left[\frac{2\pi m^* k_B T}{h^2} \right]^{3/2}$$

Par analyse du nombre de porteurs de charge participant à la conduction dans GaAs, EDDOLLS (11) montre qu'il est nécessaire de tenir compte des premiers niveaux excités lorsque l'énergie d'activation thermique ϵ_D est trouvée supérieure à 3,8 meV (Cf. fig. I.6.b). Nos échantillons faisant apparaître des énergies ϵ_D inférieures dans tous les cas à 3,5 meV (Cf. § III-1-3), l'ensemble des niveaux excités est inclus dans le quasi-continuum ; l'expression (I.2.10) se simplifie alors en ne tenant compte que du niveau donneur fondamental pour s'écrire :

$$\frac{n(T) [N_A + n(T)]}{[N_D - N_A - n(T)]} = N_c \cdot \beta \cdot \exp \left(- \frac{\epsilon_D}{k_B T} \right) \quad (\text{I.2.11})$$

Dans le domaine de validité de cette relation, EDDOLLS (11) a montré que le facteur de dégénérescence β est très voisin de $\frac{1}{2}$, valeur que nous utiliserons dans l'exploitation de nos mesures. Les résultats ci-dessus ne sont valables que si le gaz d'électrons de la bande de conduction reste non dégénéré ce qui est le cas pour les échantillons étudiés comme nous le verrons au § III-1-3.

I-2-4- Equation de transport

L'application d'une force extérieure $\vec{F}$ aux électrons d'un cristal modifie leur fonction de distribution. A la place de la fonction de FERMI $f_0(\epsilon)$ décrivant l'équilibre thermodynamique, cette nouvelle fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ traduit d'une part, l'effet des forces extérieures sur les porteurs de charge et d'autre part les interactions de ces mêmes porteurs de charge avec les imperfections présentes dans le cristal (statiques, dynamiques, chargées et neutres).

Le nombre d'électrons dans un élément de volume $d^3r d^3k$ de l'espace des phases est donné, à l'instant t par :

$$\frac{1}{4\pi^3} \cdot f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3r d^3k \quad (\text{I.2.12})$$

Un électron, caractérisé par son vecteur d'onde $\vec{k}$ et son énergie $\epsilon(\vec{k})$, a son évolution définie par les relations :

$$\dot{\vec{r}} = \frac{1}{\hbar} \overrightarrow{\nabla_k \epsilon(k)} \quad \text{et} \quad \hbar \dot{\vec{k}} = \vec{F} \quad (\text{I.2.13})$$

Dans une approche semi-classique, l'électron "passe", entre les instants t et $t+dt$ de la position d'espace $\vec{r}$ à $\vec{r} + \dot{\vec{r}} dt$ et les forces extérieures font varier son vecteur d'onde de $\vec{k}$ à $\vec{k} + \dot{\vec{k}} dt$. Cette évolution est décrite par l'équation de BOLTZMANN :

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt} = - \dot{\vec{k}} \cdot \overrightarrow{\nabla_k} f - \dot{\vec{r}} \cdot \overrightarrow{\nabla_r} f + \frac{\partial f}{\partial t} + \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int.}} \quad (\text{I.2.14})$$

qui peut s'exprimer sous la forme :

$$\frac{df(r, k, t)}{dt} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{ext}} + \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}} \quad (\text{I.2.15})$$

où le terme $\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{ext}}$ traduit l'action des forces extérieures et où le terme $\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}}$ représente l'effet des diverses collisions des porteurs de charge à l'intérieur du cristal.

En régime stationnaire, c'est-à-dire sans variation des forces extérieures au cours du temps, cette équation devient :

$$0 = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{ext}} + \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}} \quad (\text{I.2.16})$$

soit encore :

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}} = \dot{\vec{k}} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + \dot{\vec{r}} \cdot \nabla_{\vec{r}} f \quad (\text{I.2.17})$$

Pour expliciter le terme $\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}}$, il est nécessaire d'introduire les

interactions des électrons avec les défauts du réseau cristallin : celles-ci sont décrites à partir de la probabilité par unité de temps $P(\vec{k}, \vec{k}')$ qu'un électron passe de l'état $\vec{k}$ à l'état $\vec{k}'$ sous l'action des potentiels perturbateurs dus aux différentes imperfections, ce qui donne :

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}} = \frac{1}{8\pi^3} \int \left\{ P(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') [1-f(\vec{k})] - P(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}) [1-f(\vec{k}')] \right\} d^3k' \quad (\text{I.2.18})$$

où $f(\vec{k})$ est la probabilité d'occupation de l'état $\vec{k}$.

Si les forces extérieures sont d'amplitudes faibles, les probabilités de transfert $P(\vec{k}, \vec{k}')$ et $P(\vec{k}', \vec{k})$ peuvent être considérées comme ayant leur valeur à l'équilibre thermodynamique pour lequel on peut écrire :

$$P(\vec{k}', \vec{k}) \cdot f_0(\epsilon') [1-f_0(\epsilon)] = P(\vec{k}, \vec{k}') \cdot f_0(\epsilon) [1-f_0(\epsilon')] \quad (\text{I.2.19})$$

avec : $\epsilon = \epsilon(k)$

$\epsilon' = \epsilon(k')$

cette expression traduisant alors l'égalité des transferts $\vec{k}$ vers $\vec{k}'$ et $\vec{k}'$ vers $\vec{k}$.

Dans une situation légèrement en dehors de l'équilibre thermodynamique, la fonction de distribution s'exprime par un développement au premier ordre de la fonction de FERMI :

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\epsilon) + f_1(\vec{r}, \vec{k})$$

$$\text{ou} \quad f_1(\vec{r}, \vec{k}) = - \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \chi(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{f_0(1-f_0)}{k_B T} \chi(\vec{r}, \vec{k}) \quad (\text{I.2.20})$$

Le terme dû aux collisions internes s'écrit alors :

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}} = \frac{1}{8\pi^3 k_B T} \int P(\vec{k}, \vec{k}') f_0(\epsilon) [1-f_0(\epsilon')] [\chi(\vec{r}, \vec{k}') - \chi(\vec{r}, \vec{k})] d^3 k' \quad (\text{I.2.21})$$

On obtient ainsi l'équation de BOLTZMANN linéarisée, appelée aussi équation de BLOCH :

$$\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_k f + \vec{r} \cdot \vec{\nabla}_r f = \frac{1}{8\pi^3 k_B T} \int P(\vec{k}, \vec{k}') f_0(\epsilon) [1-f_0(\epsilon')] [\chi(\vec{r}, \vec{k}') - \chi(\vec{r}, \vec{k})] d^3 k' \quad (\text{I.2.22})$$

La résolution de cette équation s'effectue selon deux méthodes dont nous allons présenter les critères d'application en vue de leur utilisation pour les différents mécanismes de diffusion des électrons libres dans le cristal.

- résolution dans l'approximation d'un temps de relaxation

Si la variation de la fonction de distribution due aux interactions électrons-imperfections peut s'exprimer par la relation :

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}} = - \frac{f-f_0}{\tau(\vec{k})} = - \frac{f_1}{\tau(\vec{k})} \quad (\text{I.2.23})$$

on se trouve dans l'approximation du temps de relaxation noté $\tau(\vec{k})$.

Lorsqu'on cesse à l'instant t_0 d'appliquer les forces extérieures, le système revient à l'équilibre thermodynamique de telle manière que l'expression suivante soit vérifiée :

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}} = \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial (f-f_0)}{\partial t} = - \frac{f-f_0}{\tau(\vec{k})} \quad (\text{I.2.24})$$

La solution prend la forme :

$$f(t) - f_0 = [f(t_0) - f_0] \cdot \exp \left[- \frac{t}{\tau(\vec{k})} \right] \quad (\text{I.2.25})$$

$\tau(\vec{k})$ apparaît alors comme la "constante de temps" du retour à l'équilibre de la fonction de distribution.

L'expression (I.2.23) peut être écrite lorsque les conditions suffisantes suivantes sont vérifiées (17) :

- l'interaction électron-imperfection est purement élastique soit : $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}')$.

- la diffusion n'est pas purement élastique et fait intervenir un échange d'énergie $\Delta\epsilon$ pour lequel $\Delta\epsilon \ll k_B T$. Il est alors possible d'écrire :

$$f_o(\epsilon') = f_o(\epsilon) + \frac{\partial f_o}{\partial \epsilon} \Delta\epsilon$$

$$\frac{1}{k_B T} f_o(\epsilon) [1 - f_o(\epsilon')] = \frac{1}{k_B T} f_o(\epsilon) [1 - f_o(\epsilon)] - \frac{\Delta\epsilon}{k_B T} f_o(\epsilon) \frac{\partial f_o}{\partial \epsilon}$$

$$\frac{1}{k_B T} f_o(\epsilon) [1 - f_o(\epsilon')] = - \frac{\partial f_o}{\partial \epsilon} \left[1 + \frac{\Delta\epsilon}{k_B T} f_o(\epsilon) \right] \approx - \frac{\partial f_o}{\partial \epsilon} \quad (I.2.26)$$

Cette simplification permet d'exprimer le terme de collisions sous la forme suivante :

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{int}} = - \frac{f}{\tau(\vec{k})} = - \frac{1}{8\pi^3} \chi(\vec{r}, \vec{k}) \frac{\partial f_o}{\partial \epsilon} \int P(\vec{k}, \vec{k}') \left[\frac{\chi(\vec{r}, \vec{k}')}{\chi(\vec{r}, \vec{k})} - 1 \right] d^3 k' \quad (I.2.27)$$

Le temps de relaxation $\tau(\vec{k})$ s'obtient par :

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{1}{8\pi^3} \int P(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{\chi(\vec{r}, \vec{k}')}{\chi(\vec{r}, \vec{k})} \right] d^3 k' \quad (I.2.28)$$

Nous montrerons ultérieurement que la plupart des mécanismes de dispersion des électrons peut être traitée dans cette approximation.

- Résolution par une méthode variationnelle

Un exposé mathématique du principe variationnel de KOHLER a été décrit par HAUG (18). Une approche physique de cette méthode peut être donnée en l'absence de champ magnétique et à l'état stationnaire.

Un opérateur collision est défini par la relation :

$$C \cdot \chi(\vec{k}) = \frac{1}{8\pi^3 k_B T} \int P(\vec{k}, \vec{k}') f_o(\epsilon) \cdot [1 - f_o(\epsilon')] \cdot [\chi(\vec{k}') - \chi(\vec{k})] d^3 k' \quad (I.2.29)$$

Les forces extérieures, dues uniquement à un champ électrique $\vec{E}$ donnent une contribution dans l'équation de BOLTZMANN s'exprimant par :

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_r f$$

En supposant que $\vec{\nabla}_k f \approx \vec{\nabla}_k f_0$ et $\vec{\nabla}_r f \approx \vec{\nabla}_r f_0$, il vient :

$$e \cdot \vec{E} \cdot \dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} - \dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left[\vec{\nabla}_r \epsilon_F + (\epsilon - \epsilon_F) \vec{\nabla}_r \ln T \right]$$

En négligeant la variation de l'énergie de FERMI ϵ_F dans le volume du cristal, l'équation de BLOCH (I.2.22) devient :

$$F(\vec{k}) = C \cdot \chi(\vec{k}) \quad (\text{I.2.30})$$

avec
$$F(k) = \dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left[e\vec{E} - (\epsilon - \epsilon_F) \vec{\nabla}_r \ln T \right] \quad (\text{I.2.31})$$

L'entropie S du système peut être divisée formellement en deux parties, l'une S_{ext} due à l'action du champ électrique appliqué et l'autre S_{int} représentant les collisions. A l'état stationnaire, la variation d'entropie est nulle :

$$\dot{S} = \dot{S}_{\text{ext}} + \dot{S}_{\text{int}} = 0 \quad (\text{I.2.32})$$

Ces deux termes $\dot{S}_{\text{ext}}$ et $\dot{S}_{\text{int}}$ peuvent s'exprimer en fonction des intégrales suivantes (17) :

$$\dot{S}_{\text{ext}} = - \frac{1}{T} \int \chi(\vec{k}) \cdot F(\vec{k}) d^3k \quad (\text{I.2.33})$$

$$\dot{S}_{\text{int}} = \frac{1}{T} \int \chi(\vec{k}) \cdot C \cdot \chi(\vec{k}) d^3k \quad (\text{I.2.34})$$

L'effet du champ électrique extérieur est de tendre à aligner les moments des porteurs de charge, c'est-à-dire à créer un état plus ordonné : ceci correspond à une diminution d'entropie. Par contre, les collisions des électrons avec les imperfections cristallines perturbent cet état et contribuent à augmenter l'entropie.

Il s'agit alors de rechercher parmi des fonctions d'essai $\chi(\vec{k})$, celle qui en satisfaisant à l'équation de BLOCH (I.2.30), donnera une variation maximum de S_{int} . HAUG (18) a cependant montré qu'une solution équivalente est fournie par la fonction $\chi(\vec{k})$ qui minimise l'expression :

$$\frac{\int \chi(\vec{k}) \cdot C \cdot \chi(\vec{k}) d^3k}{\left[\int \chi(\vec{k}) \cdot F(\vec{k}) \cdot d^3k \right]^2} \quad (I.2.35)$$

Cette procédure de calcul est utilisée lorsque l'approximation du temps de relaxation ne s'applique pas : c'est le cas en particulier de la dispersion par les phonons optiques.

I - 3 - MECANISMES DE DIFFUSION DES ELECTRONS LIBRES

Chaque mécanisme de diffusion est décrit par un temps de relaxation $\tau_i(\epsilon)$ ou par une expression équivalente lorsque l'approximation du temps de relaxation ne se justifie pas. Dans les domaines de température où plusieurs processus de dispersion interviennent, un temps de relaxation effectif global $\tau(\epsilon)$ est obtenu par l'expression :

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \sum_i \frac{1}{\tau_i(\epsilon)} \quad (I.3.1)$$

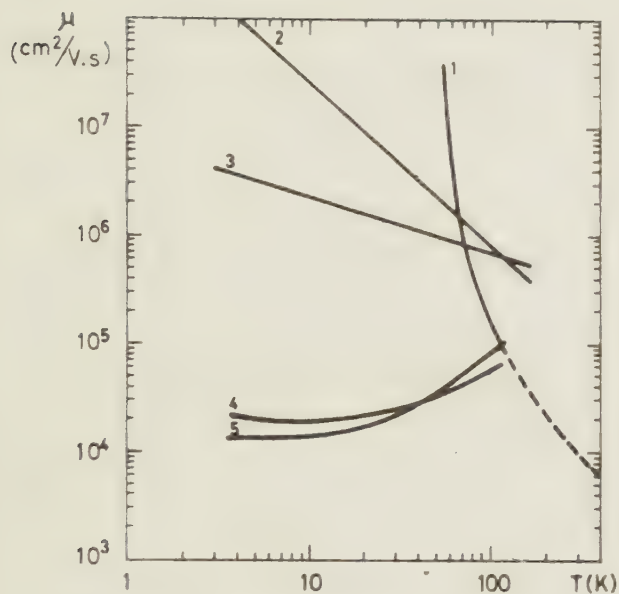
Celle-ci suppose les mécanismes de diffusion indépendants les uns des autres et néglige les dispersions d'électron qui subissent simultanément plusieurs potentiels diffusants.

Pour un cristal non dégénéré dont la bande de conduction est parabolique, la mobilité de conduction (57) s'obtient directement par : (Cf. fig. I.8)

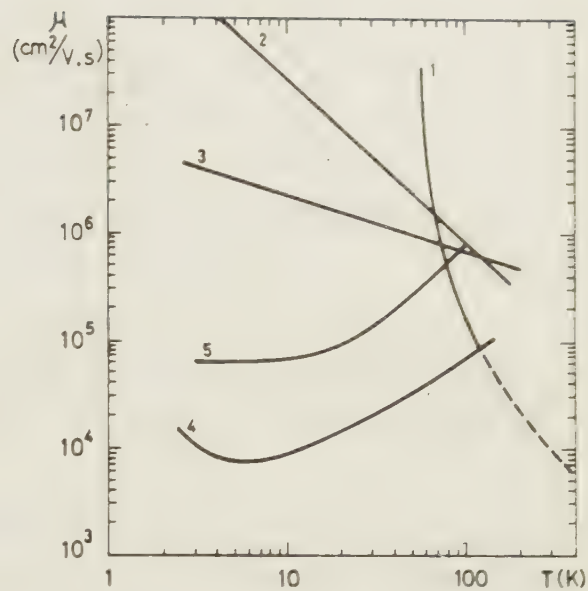
$$\mu = \frac{e \cdot \langle \tau \rangle}{m^*} \quad (I.3.2)$$

où le temps de relaxation moyen $\langle \tau \rangle$ est donné par :

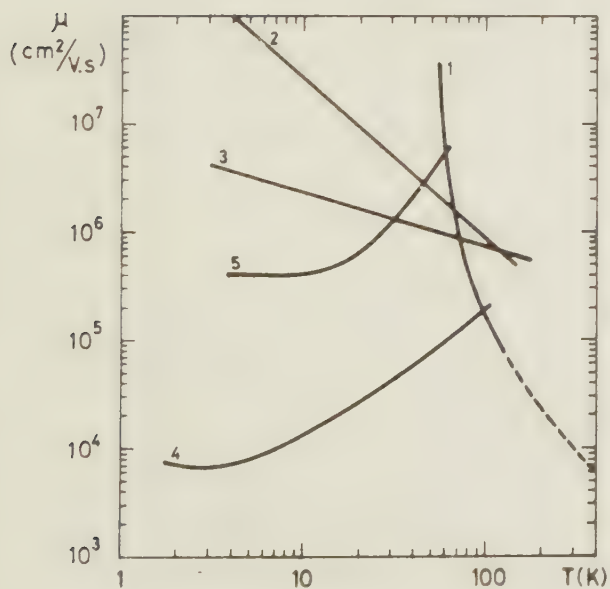
$$\langle \tau \rangle = \frac{4}{3 \cdot \pi^{1/2}} \int_0^\infty \tau(x) \cdot x^{3/2} \cdot \exp(-x) \cdot dx \quad (I.3.3)$$



a. $N_A = 1,47 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
 $N_D = 7,62 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$



b. $N_A = 1,89 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
 $N_D = 3,03 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$



c. $N_A = 6,92 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
 $N_D = 8,82 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$

FIG. I.8 Variations calculées de la mobilité dans GaAs pour 3 types de dopage en impuretés

1. diffusion par les phonons optiques (d'après WOLFE et coll. (27))
2. diffusion par le potentiel de déformation
3. diffusion par les modes piézoélectriques
4. diffusion par les impuretés ionisées
5. diffusion par les impuretés neutres

x représentant l'énergie de l'électron en unité $k_B T$ ($x = \frac{\epsilon}{k_B T}$). L'expression (I.3.3) utilisant la statistique classique, n'est valable que pour les matériaux non dégénérés. WOLFE et coll. (58) ont par ailleurs montré que pour des concentrations en électrons allant jusqu'à $0,5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, l'erreur introduite par l'emploi de la statistique classique est toujours inférieure à 2%, ce qui justifie son utilisation dans notre étude.

Nous allons considérer successivement les divers processus de diffusion possibles (dynamiques, statiques et interélectroniques) pour un électron libre dans le semi-conducteur en rappelant les hypothèses qui ont permis d'obtenir les expressions $\tau_i(\epsilon)$.

Le traitement est réalisé dans tous les cas en considérant la bande de conduction de type parabolique et fait appel à la méthode des perturbations. Celle-ci ne se justifie pleinement que lorsque le potentiel diffusant peut constamment être considéré comme faible au sens de cette théorie : l'énergie potentielle d'interaction doit donc être toujours beaucoup plus petite que l'énergie incidente de l'électron. Cette condition, équivalente à l'approximation de BORN de la théorie des collisions, est réalisée pour tous les types de dispersion sauf aux basses températures dans le cas des impuretés ionisées que nous examinerons en détail.

I-3-1- Modes acoustiques non polaires (potentiel de déformation)

Les ondes acoustiques se propageant dans un cristal, modifient le potentiel périodique que subit un électron libre. BARDEEN et SHOCKLEY (20) ont fait les remarques suivantes concernant ce mode de diffusion :

- les électrons interagissent préférentiellement avec les modes vibratoires acoustiques de même longueur d'onde. Or, la longueur d'onde associée aux électrons est grande par rapport au pas du réseau cristallin : dans GaAs à 77K, un électron d'énergie $k_B T$ a une vitesse v de l'ordre de $1,9 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$. Sa longueur d'onde, voisine de 580 Å est de plus d'un ordre de grandeur supérieure au paramètre du réseau de GaAs qui est de 5,65 Å. Le transfert d'énergie $\Delta\epsilon$ au cours d'une diffusion, correspond à l'énergie du phonon qui intervient dans cette interaction, soit 0,37 meV qui est faible devant $k_B T$. Ces deux considérations justifient d'une part, l'utilisation des constantes élastiques macroscopiques

du matériau et d'autre part la description de cette interaction dans l'approximation du temps de relaxation.

- la longueur d'onde associée aux électrons étant grande comparée au paramètre du réseau, le problème local de l'interaction peut être traité à l'échelle macroscopique en prenant comme potentiel perturbateur :

$$H' = E_1 \cdot \Delta u(\vec{r}) \quad (I.3.4)$$

où E_1 est la "constante de déformation" et $\vec{u}(\vec{r})$ le vecteur déplacement local par rapport à la position d'équilibre.

Considérant la diffusion de l'électron de l'état $\vec{k}$ vers l'état $\vec{k}'$, la loi de conservation du moment conduit à :

$$\begin{aligned} \vec{k}' &= \vec{k} + \vec{q} && \text{pour l'absorption d'un phonon de vecteur d'onde } \vec{q}. \\ \text{et } \vec{k}' &= \vec{k} - \vec{q} && \text{pour l'émission d'un phonon de vecteur d'onde } \vec{q}. \end{aligned}$$

La probabilité par unité de temps qu'un électron quitte l'état $\vec{k}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^c(\vec{k})} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}} \left\{ \left[\langle \vec{k}+\vec{q}, N_{q-1} | H' | \vec{k}, N_q \rangle \right]^2 \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, N_q} - \epsilon_{\vec{k}, N_q}) \right. \\ &\quad \left. + \left[\langle \vec{k}-\vec{q}, N_{q+1} | H' | \vec{k}, N_q \rangle \right]^2 \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, N_q} - \epsilon_{\vec{k}, N_q}) \right\} \quad (I.3.5) \end{aligned}$$

$$\text{avec : } \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, N_{q-1}} - \epsilon_{\vec{k}, N_q} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (2\vec{k} \cdot \vec{q} + q^2) - \hbar \cdot \omega_q$$

N_q est le nombre moyen de phonons de vecteur d'onde $\vec{q}$. Supposant l'équipartition en énergie des modes de phonons et ne considérant que les ondes longitudinales, cette probabilité s'exprime par (22) :

$$\frac{1}{\tau^c(\epsilon)} = \frac{2^{1/2}}{\pi \hbar^4} \frac{(m^*)^{3/2} E_1^2}{C_\ell} k_B T \cdot \epsilon^{1/2} \quad (I.3.6)$$

où C_ℓ est la constante d'élasticité moyenne longitudinale.

La relation entre ce temps moyen entre deux collisions τ^c et le temps de relaxation τ , introduit pour résoudre l'équation de BLOCH, s'obtient à partir des relations (I.2.29) et (I.2.30) en régime isotherme :

$$\frac{1}{\tau} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} e \vec{E} = - \frac{f_0 - f}{\tau} \quad (I.3.7)$$

si le champ électrique $\vec{E}$ est colinéaire à un axe $O\vec{x}$, cette expression à :

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &= f_0 + e\tau \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} E v_x & \text{avec } \chi(\vec{k}) &= - e \cdot \tau \cdot E \cdot v_x \\ f(\vec{k}) &= f_0 + e\tau \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} E v_x \cos \theta & \text{avec } \chi(\vec{k}') &= - e \cdot \tau \cdot E \cdot v_x \cdot \cos \theta \end{aligned}$$

L'équation (I.2.28) s'écrit alors :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{8\pi^3} \int P(\vec{k}, \vec{k}') \cdot (1 - \cos \theta) \cdot d^3k' \quad (I.3.8)$$

Considérant la diffusion élastique et les surfaces à énergie constante sphériques, le terme de probabilité $P(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépend que de l'angle de diffusion θ entre $\vec{k}$ et $\vec{k}'$: SHOCKLEY (23) a montré que dans ce cas, la relation entre τ et τ^c s'exprimait par :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\langle 1 - \cos \theta \rangle}{\tau^c} \quad (I.3.9)$$

où $\langle 1 - \cos \theta \rangle$ représente la valeur moyenne de $(1 - \cos \theta)$ sur toutes les collisions. Pour les phonons acoustiques non polaires, les directions de diffusion sont toutes également probables ce qui conduit à $\langle \cos \theta \rangle = 0$: le temps de relaxation est dans ce cas, identique au temps moyen entre collisions τ_c et vaut donc :

$$\frac{1}{\tau_{\text{déf}}(\epsilon)} = \frac{2^{1/2}}{\pi \hbar^4} \frac{(m^*)^{3/2} \cdot E_1^2}{c_\ell} k_B T \cdot \epsilon^{1/2} \quad (I.3.10)$$

I-3-2- Modes acoustiques polaires (diffusion piézo-électrique)

Dans les semi-conducteurs qui ne possèdent pas de centre d'inversion, le déplacement relatif d'atomes voisins entraîne un champ électrique de polarisation locale. MEIJER et POLDER (24) ont les premiers estimé en fonction de la température, la variation de la mobilité des électrons due à ce type de diffusion dans les réseaux du type blende de zinc. Ils ont obtenu $\mu \propto T^{-1/2}$, ce qui laisse supposer un rôle important des modes piézo-électriques dans un domaine de basses températures.

Le calcul s'effectue de manière analogue à celui réalisé pour la diffusion par le potentiel de déformation et dans le cas de GaAs et des composés ayant la symétrie de la blende de zinc, ZOOK (25) a montré que le temps de relaxation prend la forme suivante :

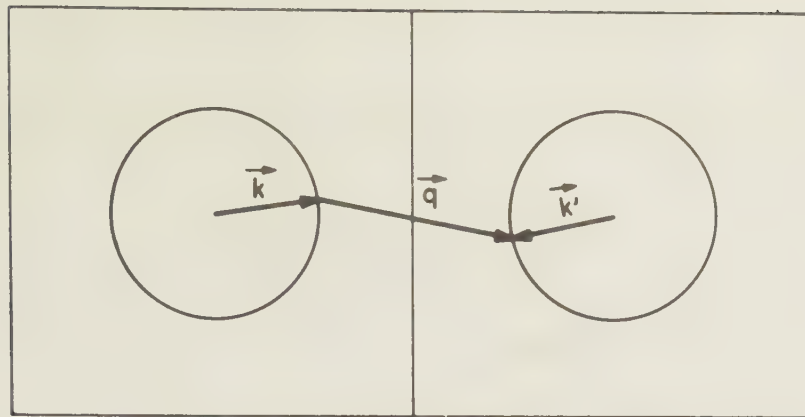
$$\frac{1}{\tau_{\text{piézo}}(\epsilon)} = \frac{e^2}{2^{3/2} \cdot \pi} \frac{\sqrt{m^*} \cdot h_{14}^2}{\hbar^2} \cdot \left[\frac{4}{C_t} + \frac{3}{C_\ell} \right] k_B T \cdot \epsilon^{-1/2} \quad (\text{I.3.11})$$

dans laquelle :

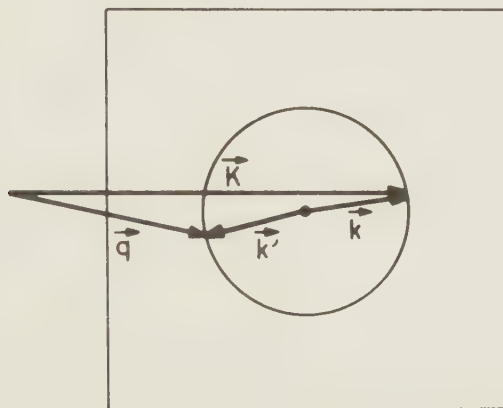
- C_ℓ et C_t sont les constantes d'élasticité moyennes longitudinale et transversale.
- h_{14} la "constante piézo-électrique" (valeur des éléments non nuls du tenseur réduit).

I-3-3- Processus UMKLAPP

Les deux paragraphes précédents ont décrit des processus tels que $\vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{q} = \vec{0}$ où $\vec{q}$ est le vecteur d'onde du phonon ; des processus vérifiant $\vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{q} = \vec{K}$ où $\vec{K}$ est un vecteur de translation du réseau réciproque sont aussi possibles (Cf. fig. I.9). Aux basses températures dans GaAs et à champ électrique faible les électrons de la bande de conduction sont tous au voisinage de l'extrémum ; les processus UMKLAPP possibles font intervenir des phonons de vecteur d'onde $\vec{q}$ de module voisin de $\frac{|\vec{K}|}{2}$. L'énergie de ces phonons est grande (supérieure à 10 meV, Cf. fig. I.10) et leur nombre est excessivement limité ; la probabilité de réaliser des processus de ce type est ainsi très faible et sera négligée.



a. représentation dans un schéma de zone étendue.



b. représentation dans un schéma de zone réduite.

FIG. I.9 Processus UMKLAPP

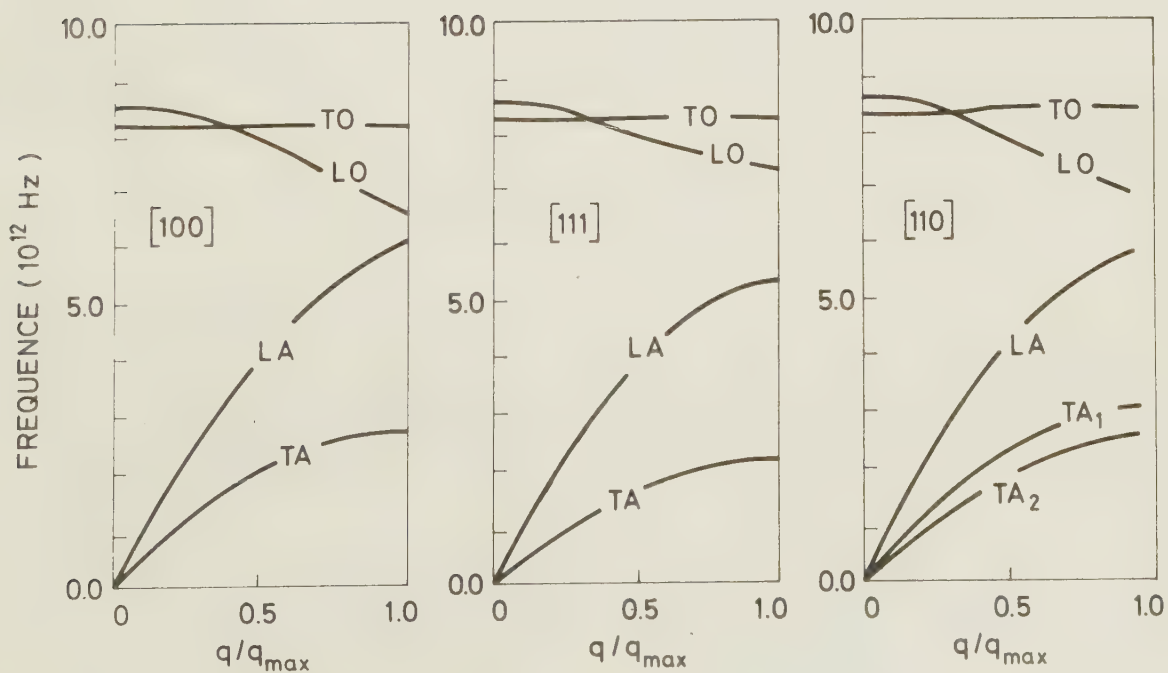


FIG. I.10 Courbes calculées de la dispersion des phonons dans GaAs (d'après JOHNSON et COCHRAN (73))

I-3-4- Modes optiques non polaires

La diffusion par les modes optiques non polaires, encore dénommée par potentiel de déformation optique, intervient aussi bien dans les cristaux qui possèdent un centre d'inversion que dans ceux qui en sont dépourvus. CONWELL (22) a évalué le temps de relaxation correspondant par un calcul analogue à celui utilisé pour les modes acoustiques. Cependant, EHRENREICH (4) a montré que dans GaAs, l'élément de matrice déterminé pour cette interaction non polaire, s'annule à cause de la symétrie des fonctions d'onde des électrons. Bien que cette propriété ne soit plus rigoureuse pour des porteurs non situés au minimum de la bande, ceux-ci en sont suffisamment voisins pour que l'on néglige l'effet de cette interaction.

I-3-5- Modes optiques polaires

Dans les cristaux sans centre d'inversion, la polarisation locale du réseau due principalement à la branche optique longitudinale, produit une forte interaction sur les porteurs de charge. L'énergie des modes optiques longitudinaux est prise constante et égale à $\hbar\omega_\ell$ (Cf. fig. I.10). L'énergie $\hbar\omega_\ell$ du phonon optique émis ou absorbé étant grande, l'approximation du temps de relaxation ne peut se justifier que pour des températures telles que $T \gg \frac{\hbar\omega_\ell}{k_B}$, ce qui correspond, dans le cas de GaAs à $T \gg 427K$. Se plaçant dans ces conditions, HOWARTH et SONDHEIMER (19) ont obtenu :

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{2\pi \cdot e^4 \cdot (2m^*)^{1/2}}{a^3 \cdot M \cdot (\hbar\omega_\ell)^2} k_B T \cdot \epsilon^{-1/2} \quad (I.3.12)$$

avec : M, masse réduite d'une cellule unité

a, paramètre du réseau

Pour des températures inférieures, à l'aide de la méthode variationnelle EHRENREICH (5) exprime l'équivalent d'un temps de relaxation par l'expression :

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{4\pi (2m^*)^{1/2} \cdot e^2 \cdot e^{*2}}{M \cdot \Omega \cdot (k_B \theta_\ell)^{3/2}} \theta_\ell^{1/2} \frac{\left(\frac{\theta_\ell}{T}\right)^r}{\exp\left(\frac{\theta_\ell}{T}\right) - 1} \left[\frac{\epsilon}{k_B T}\right]^{-r} \quad (I.3.13)$$

avec : θ_ℓ , "température" des phonons optiques définie par $k_B \theta_\ell = \hbar \omega_\ell$
 Ω , volume de la cellule unité
 e^* , charge effective ionique définie par la formule de CALLEN (55)

$$e^{*2} = \frac{\Omega}{4\pi} \cdot M \cdot \omega_\ell^2 \left(\frac{1}{\kappa_{\text{opt}}} - \frac{1}{\kappa} \right) \quad (\text{I.3.14})$$

où κ_{opt} représente la constante diélectrique optique.

Le paramètre r est déterminé par l'expression :

$$\frac{1}{2} \theta_\ell^{\frac{1}{2} - r} \cdot \Gamma\left(\frac{5}{2} + r\right) = G^{(1)} \cdot e^{-\xi} \quad (\text{I.3.15})$$

dans laquelle le terme $G^{(1)} \cdot e^{-\xi}$ rend compte de l'écrantage dû aux électrons et a été calculé par EHRENREICH (26).

L'utilisation de ce résultat n'est cependant pas possible sur toute la gamme de température. Dans le cas de GaAs, WOLFE et coll. (27) sont conduits à limiter son application à des températures inférieures à 120K ou supérieures à 300K. Compte tenu de la relative complexité de l'expression (I.3.13) obtenue pour ce mode de dispersion, ainsi que de son domaine restreint de validité, nous limiterons notre analyse à une zone de températures où l'influence des phonons optiques est négligeable (Cf. fig. I.8). Cette zone sera déterminée pour chaque échantillon par comparaison entre la courbe expérimentale de mobilité de HALL et la courbe calculée, comme précisé au chapitre III.

I-3-6- Diffusion par les impuretés ionisées

Les atomes d'impuretés ionisées présents dans le cristal, créent localement un champ perturbateur dont l'interaction avec un électron se décrit simplement grâce aux approximations suivantes :

- . le centre diffusant possède une masse infinie, donc il n'intervient aucune énergie de recul de l'ion.
- . chaque centre ne se trouve qu'une fois ionisé.
- . l'interaction est essentiellement élastique.
- . la diffusion est réduite au problème à deux corps : interaction d'un électron et d'un ion.
- . le potentiel créé par un centre chargé a une symétrie sphérique, ce qui permet d'ignorer l'influence de la symétrie propre du cristal.

Dans ces conditions, l'interaction d'un électron avec un site chargé entraîne principalement une dispersion angulaire du porteur incident et le traitement peut être réalisé dans l'approximation du temps de relaxation. Un premier calcul fut effectué par CONWELL et WEISSKOPF (28) en assimilant le potentiel créé par l'ion présent à un potentiel de COULOMB pur : le traitement est alors analogue à celui de la diffusion RUTHERFORD. Le problème de la divergence de l'intégrale conduisant à l'expression du temps de relaxation est supprimé en limitant arbitrairement le calcul aux électrons dont le paramètre d'impact est inférieur à la demi-distance moyenne entre les impuretés ionisées du cristal. Un autre moyen de supprimer la divergence de l'intégrale et qui peut apparaître physiquement plus réaliste est de tenir compte de l'effet d'écran dû aux électrons libres. L'énergie potentielle de l'électron prend alors la forme :

$$V(r) = \frac{e^2}{\kappa r} e^{-\frac{r}{\lambda_D}} \quad (\text{I.3.16})$$

où $\lambda_D = \left(\frac{\kappa \cdot k_B \cdot T}{4\pi \cdot e^2 \cdot n} \right)^{1/2}$ est la distance d'écrantage de DEBYE-HUECKEL pour un semi-conducteur non dégénéré.

Dans l'approximation de BORN, c'est-à-dire en supposant l'énergie potentielle diffusante faible par rapport à l'énergie cinétique de l'électron incident, l'élément de matrice $V_{k',k}$ s'obtient pour un volume unité par :

$$V_{k',k} = \frac{e^2}{\kappa} \int \frac{1}{r} e^{-\frac{r}{\lambda_D}} \cdot e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} \cdot d^3r \quad (\text{I.3.17})$$

soit encore :

$$V_{k',k} = \frac{e^2}{\kappa} \frac{4\pi}{(\lambda_D)^{-2} + |\vec{k}' - \vec{k}|^2}$$

La diffusion étant élastique, $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ et θ représentant l'angle de diffusion entre $\vec{k}$ et $\vec{k}'$, il vient :

$$|\vec{k}' - \vec{k}| = 2|\vec{k}| \cdot \sin \frac{\theta}{2}$$

ce qui conduit à :

$$|v_{k',k}|^2 = \left[\frac{\pi e^2}{\kappa |\vec{k}|^2} \cdot \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{1}{4|\vec{k}|^2 \lambda_D^2}} \right]^2 \quad (I.3.18)$$

La probabilité de transition par centre s'écrit :

$$P(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |v_{k',k}|^2 \delta(\epsilon' - \epsilon) \quad (I.3.19)$$

l'approximation des bandes d'énergies paraboliques conduit à :

$$P(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi m^*}{\hbar^3 \cdot |\vec{k}|} |v_{k',k}|^2 \cdot \delta(|\vec{k}'| - |\vec{k}|) \quad (I.3.20)$$

La diffusion par un centre chargé possédant la symétrie axiale définie par la direction de l'électron incident, l'expression du temps de relaxation (I.3.8) prend la forme suivante :

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{m^* \cdot |\vec{k}| \cdot N_I}{2\pi \cdot \hbar^3} \int_0^\pi |v_{k',k}|^2 (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (I.3.21)$$

avec N_I , concentration totale en impuretés ionisées

et :

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{2\pi \cdot m^* \cdot e^4 \cdot N_I}{\kappa \cdot \hbar^3 \cdot |\vec{k}|^3} \int_0^\pi \frac{\sin^3 \frac{\theta}{2} \cdot \cos \frac{\theta}{2}}{\left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{1}{4\lambda_D^2 |\vec{k}|^2} \right)^2} \cdot d\theta \quad (I.3.22)$$

Après intégration et pour un semi-conducteur de type n, c'est-à-dire avec $N_I = 2N_A + n$, le temps de relaxation s'exprime finalement par : (29)

$$\frac{1}{\tau_{II}(\epsilon)} = \frac{\pi e^4 (2N_A + n)}{\kappa^2 (2m^*)^{1/2} \cdot \epsilon^{3/2}} \left[\ln(1+b) - \frac{b}{1+b} \right] \quad (I.3.23)$$

$$\text{où } b = \frac{2m^* \cdot \kappa \cdot k_B T}{\pi \cdot \hbar^2 \cdot e \cdot n} \epsilon$$

BROOKS (29) propose de remplacer, dans b , la concentration en électrons par :

$$n^* = n + \left[(n + N_A) \left(\frac{N_D - N_A - n}{N_D} \right) \right]$$

exprimant l'effet d'écran dû aux autres impuretés ionisées.

Le résultat (I.3.23) dénommé équation de BROOKS-HERRING ne fait intervenir aucune différence entre la diffusion d'un électron par un accepteur ionisé et celle par un donneur ionisé. D'autre part, le temps de relaxation $\tau_{II}(\epsilon)$ est approximativement proportionnel à $\epsilon^{3/2}$: les électrons de faible énergie subissent ainsi une forte dispersion par les impuretés ionisées et dans leur cas, l'approximation de BORN ne se trouve plus justifiée. SCLAR (30) précise pour ce mécanisme de diffusion la limite de validité de l'approximation de BORN qu'il exprime par :

$$|\vec{k}| \gg \frac{m^* \cdot e^2}{\kappa \cdot \hbar^2}$$

soit encore :

$$\epsilon^{1/2} \gg \frac{(m^*)^{1/2} \cdot e^2}{\sqrt{2} \cdot \kappa \cdot \hbar}$$

Pour un cristal de GaAs, cette énergie limite est égale à 5,7meV, valeur qui est voisine de l'énergie d'ionisation ϵ_I d'un atome d'impureté. BLATT (30) a étudié la dispersion sur les impuretés ionisées lorsque l'approximation de BORN n'est plus valable. Il procède pour cela au calcul de la section de diffusion différentielle par la méthode des ondes partielles (31). Les résultats numériques correspondants sont représentés sur la figure I.11, dans laquelle les variables k' , λ' et A' sont définies par :

$$\begin{aligned} k' &= Q \cdot k && \text{avec } k \text{ vecteur d'onde de l'électron incident} \\ \lambda'_D &= \frac{\lambda_D}{Q} && \text{avec } \lambda_D \text{ longueur d'écrantage de DEBYE-HUECKEL} \\ A' &= \frac{0,28}{Q^2} A && \text{avec } A \text{ section de diffusion totale.} \end{aligned}$$

Le coefficient Q est déterminé par :

$$Q = 2,8 \left(\frac{\kappa}{m^*} \right) = 527,5 \quad \text{dans le cas de GaAs.}$$

La section de diffusion totale A pour un centre s'exprimant (32) :

$$A(\epsilon) = \frac{m^{*2}}{2\pi \cdot \hbar^4} \int_0^\pi |V_{kk'}|^2 \cdot (1 - \cos\theta) \cdot \sin\theta \cdot d\theta \quad (I.3.24)$$

la relation (I.3.21) permet d'obtenir le temps de relaxation en fonction de la section de diffusion totale par :

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{\sqrt{2} \cdot N_I}{m^{*1/2}} \epsilon^{1/2} \cdot A(\epsilon) \quad (I.3.25)$$

L'examen des résultats de BLATT présentés sur la figure I.11, montre que l'approximation de BORN conduit à une efficacité exagérée de cette diffusion sur les porteurs lents. Nous tenons compte des résultats de BLATT en exprimant le temps de relaxation de la manière suivante :

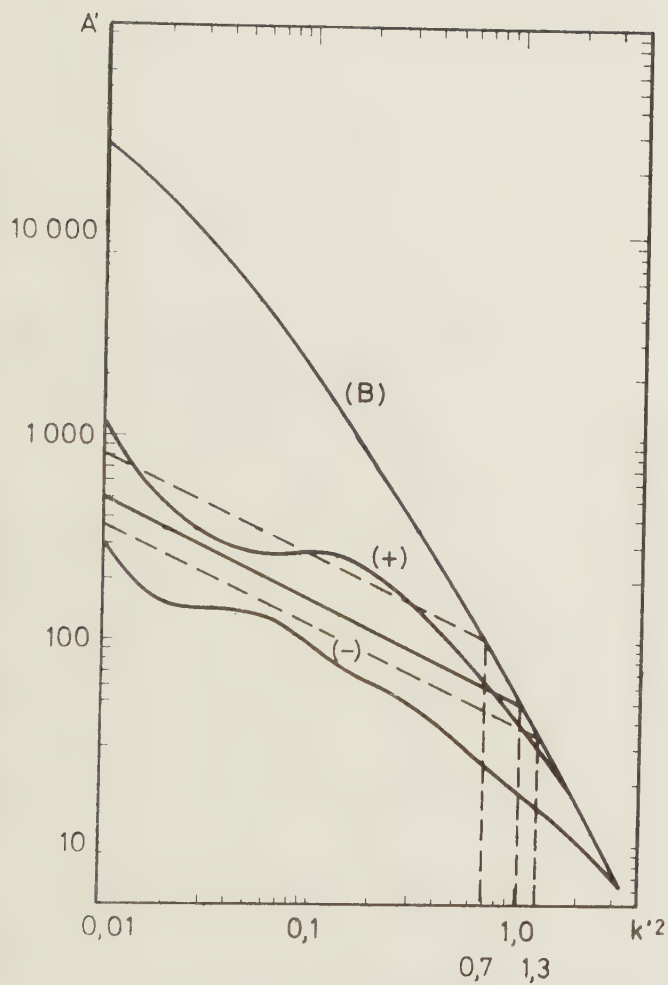
- Pour les électrons ayant $k'^2 > 1$ (électrons de vitesse appréciable), les résultats de BLATT étant très voisins de ceux calculés dans l'approximation de BORN nous prendrons le temps de relaxation exprimé par la relation (I.3.23).

- Pour les électrons ayant $k'^2 < 1$ (électrons de faible vitesse), les résultats de BLATT s'écartent notablement de ceux obtenus dans l'approximation de BORN. Les variations de la section efficace totale A' avec $\vec{k}'$ et la température T ne s'exprimant pas par une relation simple, nous schématisons ces variations par la loi suivante :

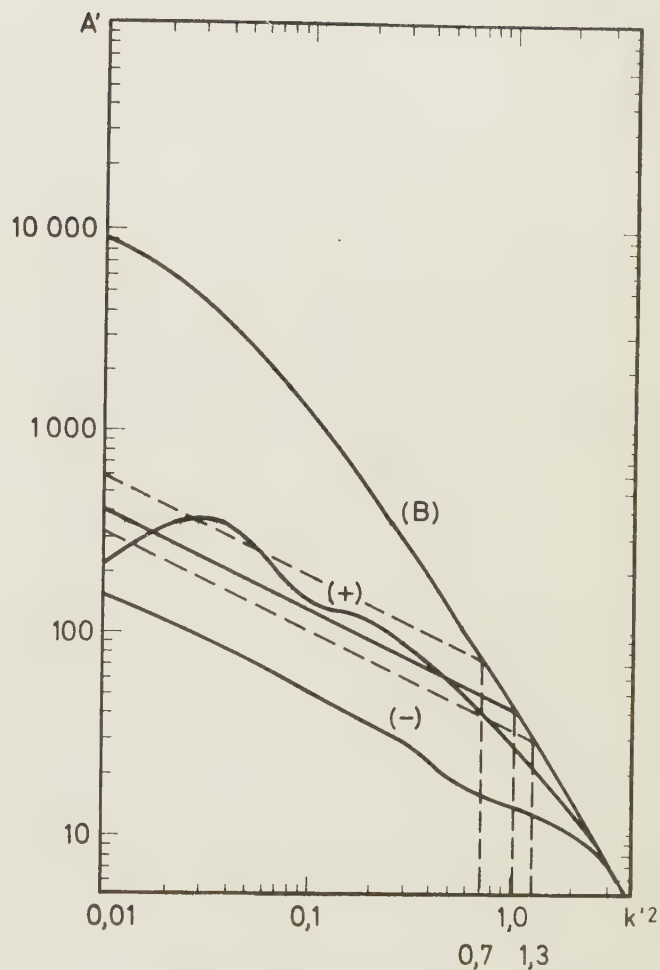
$$A'(k'^2) = \alpha \cdot (k'^2)^{-1/2}$$

α étant choisi de telle manière que pour $k' = 1$, la valeur de A' soit la même que celle obtenue dans l'approximation de BORN. Cette loi d'approche est représentée par les droites de la figure I.11.

Dans le domaine des faibles énergies, la relation (I.3.25) montre que le temps de relaxation prend alors une valeur constante égale à celle calculée par $k'^2 = 1$ dans l'approximation de BORN. La valeur de "tronquage"

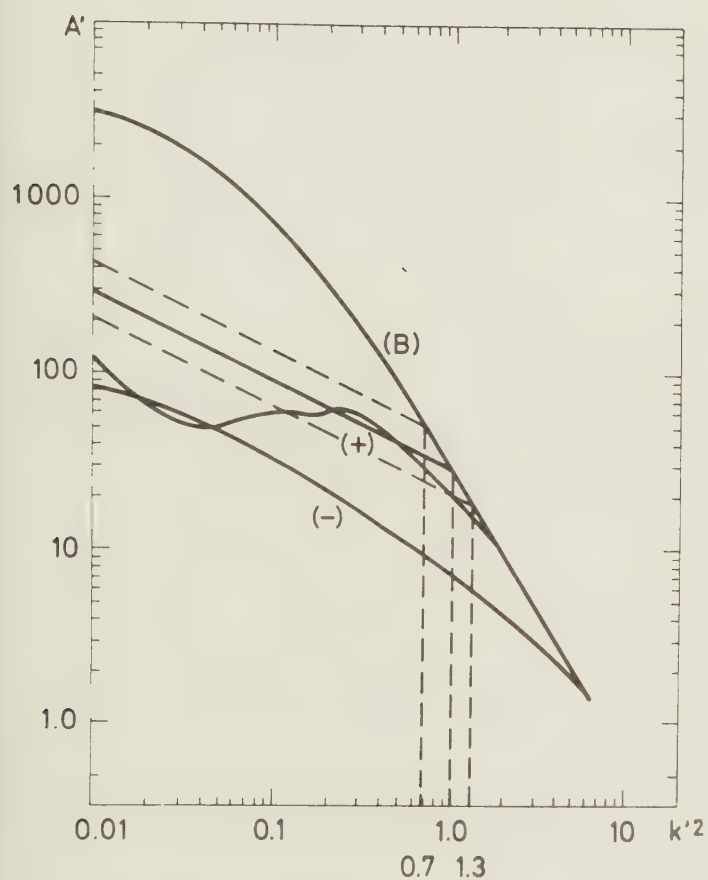


a. $\lambda_D^i = 5,00$

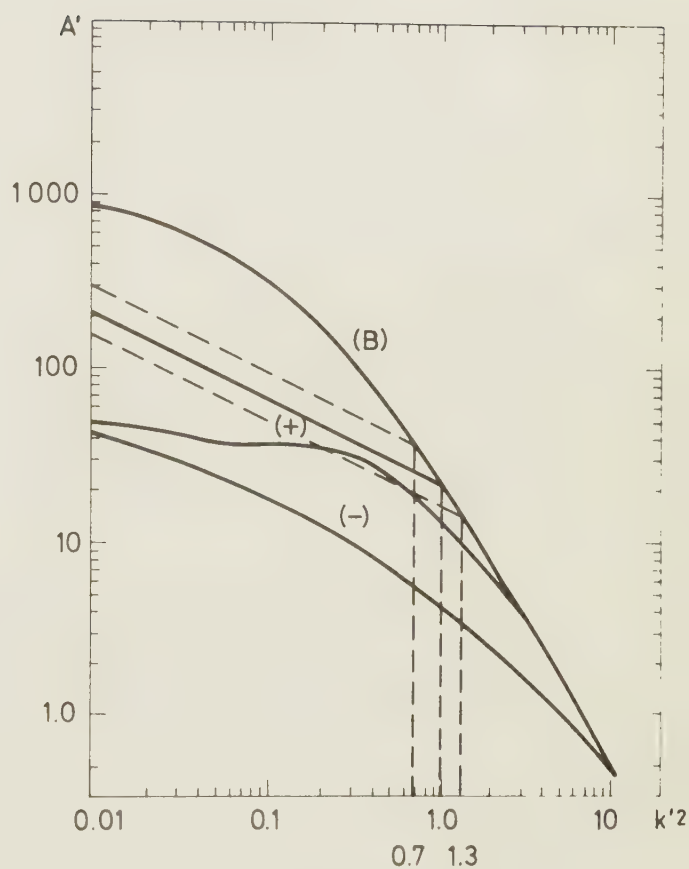


b. $\lambda_D^i = 3,33$

FIG. 1.11 Variations de la section de diffusion totale A' avec l'énergie normalisée des porteurs k'^2 . Les courbes (B), (+) et (-) ont été déterminées par BLATT [30] en utilisant l'approximation de BORN (B), la méthode des ondes partielles pour un potentiel attractif (+) et pour un potentiel répulsif (-). Les droites de pente $-1/2$ en trait plein et pointillé représentent la schématisation des courbes précédentes en fonction de trois valeurs d'énergie de tronçage.



c. $\lambda_D = 2.50$



d. $\lambda_D = 1.67$

FIG. I.11 Variations de la section de diffusion totale A' avec l'énergie normalisée des porteurs k'^2 . Les courbes (B), (+) et (-) ont été déterminées par BLATT (30) en utilisant l'approximation de BORN (B), la méthode des ondes partielles pour un potentiel attractif (+) et pour un potentiel répulsif (-). Les droites de pente $-1/2$ en trait plein et pointillé représentent la schématisation des courbes précédentes en fonction de trois valeurs d'énergie de tronquage.

$k'^2 = 1$ a été choisie de telle sorte que la courbe $A'(k'^2) = \alpha(k'^2)^{-1/2}$ soit la plus représentative possible des résultats obtenus par la méthode des ondes partielles aux basses températures (c'est-à-dire pour les valeurs de λ_D' élevées). L'énergie ϵ_0 correspondant à $k'^2 = 1$ est égale à 0,734meV dans le cas de GaAs : elle est prise constante sur toute la gamme de température analysée et pour les trois échantillons présentés. Cependant, afin d'estimer l'influence du choix de cette énergie de tronquage, quelques points expérimentaux furent exploités en prenant $k'^2 = 0,7$ et $k'^2 = 1,3$ qui correspondent respectivement à des énergies de 0,513meV et de 0,954meV : les résultats obtenus sur la mobilité de conduction et sur le facteur de diffusion sont représentés sur les figures III.6 et III.8 et commentés au chapitre III.

En résumé nous prenons comme temps de relaxation pour la diffusion sur les impuretés ionisées celui donné par la relation de BROOKS-HERRING (I.3.23) pour des énergies de porteurs supérieures à ϵ_0 et nous le considérons constant et égal à la valeur calculée pour ϵ_0 par (I.3.23) pour les électrons dont l'énergie est inférieure à ϵ_0 .

I-3-7- Diffusion par les impuretés neutres

Lorsque la température décroît, un nombre de plus en plus important d'atomes donneurs deviennent neutres. Ces impuretés neutres perturbent localement la périodicité cristalline et provoquent ainsi une dispersion des électrons de la bande de conduction.

ERGINSOY (33) a évalué le temps de relaxation correspondant à la diffusion d'un porteur lent par un atome de type hydrogénoïde en tenant compte d'une part, des effets d'échange au cours de l'interaction et d'autre part, de la polarisation de l'atome par le porteur incident. Il obtient ainsi :

$$\frac{1}{\tau_{IN}} = \frac{20.N_n.\kappa.h^3}{8\pi^3.m^{*2}.e^2} \quad (I.3.26)$$

avec N_n , concentration en impuretés neutres.

Pour un semi-conducteur de type n, la concentration en donneurs neutres N_n s'exprime directement par :

$$N_n = N_D - N_A - n(T)$$

Contrairement aux résultats obtenus pour les autres types de dispersion des électrons libres, le temps de relaxation est dans ce cas, indépendant de l'énergie du porteur diffusé.

I-3-8- Processus de diffusion dipolaire

Dans les semi-conducteurs contenant à la fois des atomes d'impuretés donneurs et accepteurs, le dipôle constitué d'un accepteur et d'un donneur tous deux ionisés, crée un champ dans le cristal dont l'intensité est beaucoup plus faible que celle due à une impureté ionisée seule. De ce fait, l'efficacité de la dispersion par ce processus sera plus faible que celle d'un ion, l'écrantage par les électrons affaiblissant encore son influence.

Le calcul du temps de relaxation correspondant à ce mécanisme de diffusion a été réalisé par SAMOILOVICH et NITSOVICH (34). L'énergie potentielle d'un électron dans le champ d'un dipôle écranté est représentée par :

$$V(r) = \frac{e^2 (\vec{\ell} \cdot \vec{r})}{\kappa \cdot r^3} \left(1 + \frac{r}{\lambda_D}\right) e^{-\frac{r}{\lambda_D}} \quad (I.3.27)$$

avec : r , distance entre l'électron et le centre du dipôle.

ℓ , distance entre les deux ions formant le dipôle.

λ_D , longueur d'écrantage.

En ne considérant aucune orientation préférentielle des dipôles dans le cristal, le temps de relaxation s'exprime par :

$$\frac{1}{\tau_{\text{dip}}(\epsilon)} = \frac{2}{3} \cdot \frac{4\pi\sqrt{2m^*} \cdot e^4 \cdot \ell^2 \cdot N}{\hbar^2 \cdot \kappa^2 \cdot \sqrt{\epsilon}} \left[\frac{1}{2(1+\gamma^2)} - \gamma^2 \left(\ln \frac{1+\gamma^2}{\gamma^2} - \frac{1}{1+\gamma^2} \right) \right] \quad (I.3.28)$$

avec : $\gamma = \frac{\hbar^2}{8m^* \cdot \lambda_D^2 \cdot \epsilon}$ et N , concentration en dipôles.

A très basse température, lorsque l'écrantage des dipôles devient négligeable ($\lambda_D \rightarrow \infty$), nous obtenons la forme simplifiée suivante :

$$\frac{1}{\tau_{\text{dip}}(\epsilon)} = \frac{4\pi \cdot \sqrt{2m^*} \cdot e^4 \cdot \ell^2 \cdot N}{3\hbar^2 \cdot \kappa^2 \cdot \sqrt{\epsilon}} \quad (\text{I.3.29})$$

L'influence de ce mode de dispersion doit être d'autant plus grande que la compensation du semi-conducteur est forte et la température basse, ce qui réduit les effets d'écrantage.

Si on veut prendre en compte la dispersion sur les dipôles constitués d'un ion accepteur négatif et d'un ion donneur positif, on ne doit pas considérer ces deux ions dans le processus de dispersion sur les impuretés ionisées. L'efficacité de la dispersion par les dipôles est beaucoup plus faible que celle sur les ions : ceci diminue la diffusion des électrons et augmente donc leur mobilité. Il est nécessaire d'estimer parmi tous les ions de la matrice cristalline ceux qui doivent être appariés en dipôles. Notant r_I la distance moyenne entre impuretés définie par

$(N_A + N_D)^{-1} = \frac{4\pi}{3} \cdot r_I^3$, il nous apparaît raisonnable de prendre comme limite supérieure de distance ℓ , entre ions formant un dipôle, la valeur $r_I/4$.

Supposant une répartition aléatoire des impuretés la distribution des distances entre impuretés est donnée par la loi de POISSON (43)

$$P(\ell) = \frac{3\ell^2}{r_I^3} e^{-\left(\frac{\ell}{r_I}\right)^3}, \text{ la densité de dipôles de "longueur" } \ell \text{ est donc } \frac{N_A^2}{N_D} P(\ell).$$

La densité de dipôles de "longueur" inférieure à $r_I/4$ est :

$$\frac{N_A^2}{N_D} \int_0^{r_I/4} e^{-\left(\frac{\ell}{r_I}\right)^3} \cdot \frac{3\ell^2}{r_I^3} d\ell = \frac{N_A^2}{N_D} \left[1 - e^{-\left(\frac{1}{4}\right)^3} \right] \approx \frac{N_A^2}{N_D} \frac{1}{64}$$

Pour un matériau de type n et se plaçant dans le cas le plus défavorable d'une très forte compensation $N_A \approx N_D$, la densité des dipôles est de l'ordre $\frac{N_A}{64}$. Aux basses températures la densité en impuretés ionisées est $2N_A$ dont il faut retirer $\frac{2N_A}{64}$ ions comptés en tant que dipôles ; négliger totalement la dispersion sur les dipôles revient à considérer 2% de centres ionisés en trop dans la formule de BROOKS-HERRING et par la

même à faire une erreur par défaut de moins de 2% sur la mobilité. Dans des cas de compensation plus faible, l'erreur est moindre ce qui nous permet de ne pas considérer ce processus.

I-3-9- Processus de diffusion moléculaire

On peut citer aussi le mécanisme de diffusion moléculaire qui peut intervenir dans un semi-conducteur compensé de type n lorsque deux atomes donneurs proches, l'un neutre, le second ionisé, ont tendance à partager l'électron périphérique : l'ensemble forme alors un centre analogue à une molécule hydrogénoïde ionisée. Ce système possède deux états (symétrique et antisymétrique) dont la séparation énergétique est faible : un électron incident peut perdre une partie de son énergie en plaçant cette molécule hydrogénoïde dans l'état excité.

Ce mécanisme de diffusion inélastique a été proposé (36) comme explication de la variation rapide de résistivité intervenant dans certains matériaux comme Ge et GaAs aux basses températures, dans le domaine de préavalanche. CALLAWAY et CUMMINGS (35) précisent qu'en moyenne la perte d'énergie par excitations moléculaires et le gain d'énergie correspondant aux désexcitations se compensent à l'équilibre thermodynamique. Par contre les pertes sont plus grandes que les gains quand la distribution électronique est fortement hors d'équilibre. L'intensité du champ électrique dans les mesures réalisées ici étant faible, la distribution est pratiquement celle de l'équilibre thermodynamique ce qui nous permet d'ignorer ce mécanisme de perte d'énergie.

I-3-10 - Collisions interélectroniques

De nombreux auteurs (13), (4) ont mentionné l'importance de l'interaction entre porteurs de charge sur la mobilité. Ce mécanisme se décrit en le considérant comme processus secondaire : dans une situation hors d'équilibre thermodynamique, les collisions électron-électron permettent une redistribution énergétique, en tendant à ramener celle-ci vers une répartition d'équilibre correspondant à une température supérieure à celle du réseau. Globalement, il y a transfert d'énergie et de moment des électrons les plus énergétiques aux électrons du "bas" de la distribution,

ceci entraînant une diminution de la mobilité. Cette brève description permet de voir que les collisions interélectroniques apparaissent d'autant plus efficaces que les processus de diffusion primaires dépendent, fortement de l'énergie de ces porteurs : ceci est le cas lorsque la dispersion par les impuretés ionisées est prépondérante. L'énergie échangée au cours d'une collision interélectronique peut être une fraction appréciable de l'énergie initiale du porteur : de ce fait, la description de cette interaction ne peut se faire au moyen de l'approximation du temps de relaxation.

Par un calcul de type variationnel, APPEL (37) a déterminé la modification de conductivité quand on tient compte des collisions électron-électron : pour cela, il utilise dans l'équation de BOLTZMANN, la fonction de distribution f définie par :

$$f = f_0 + f_1 + f_2 \quad (\text{I.3.30})$$

avec f_0 , fonction de distribution à l'équilibre

f_1 , écart à la fonction f_0 dû à un champ électrique extérieur, sans collision électron-électron et en supposant $f_1 \ll f_0$.

f_2 , écart supplémentaire dû aux collisions électron-électron.

L'interaction entre deux électrons est décrite par un potentiel de COULOMB écranté :

$$V(r) = \frac{e^2}{\kappa \cdot r} \exp \left(- \frac{r}{\lambda_D} \right) \quad (\text{I.3.31})$$

avec r , distance entre électrons.

λ_D , longueur d'écrantage de DEBYE-HUECKEL.

Une illustration des résultats obtenus par cette méthode est donnée sur la figure I.12 dans le cas d'une diffusion principale par les impuretés ionisées (38) :

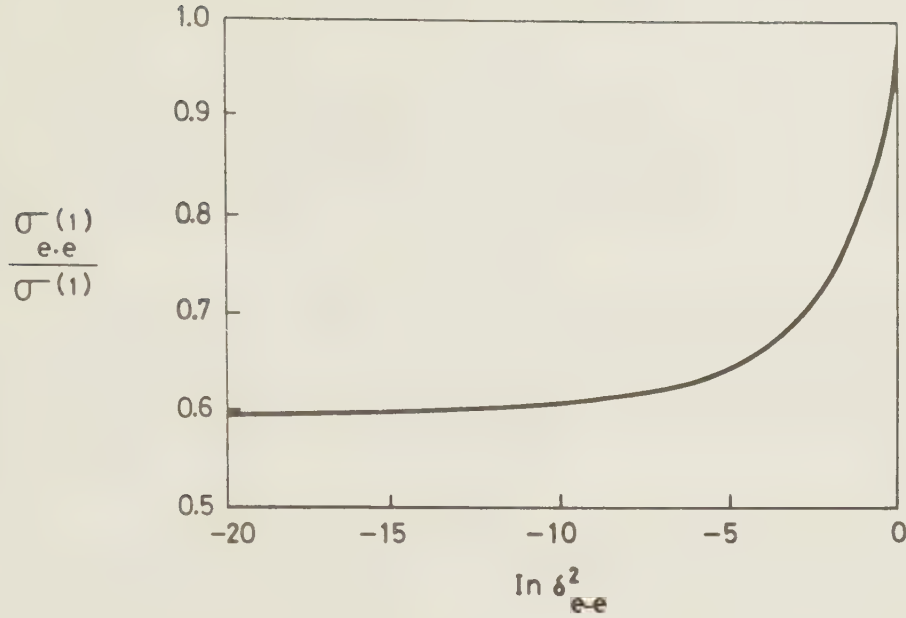


FIG. I.12 Effet de l'interaction électron-électron sur la diffusion par les impuretés ionisées (d'après APPEL (38)).

$\sigma^{(1)}$ est l'approximation au 1^{er} ordre de la conductivité électrique lors de la diffusion par les impuretés ionisées (formule de BROOKS-HERRING).
 $\sigma_{e-e}^{(1)}$ est l'approximation au 1^{er} ordre de la conductivité électrique lors de la diffusion par les impuretés ionisées en tenant compte de l'interaction électron-électron.
 σ_{e-e} est proportionnel au rapport de la longueur d'onde de l'électron sur la longueur de DEBYE ($\delta_{e-e}^2 = \frac{\hbar^2}{2\lambda_D^2 m^* k_B T}$).

Les travaux de APPEL (37) confirment également la moindre importance des collisions interélectroniques lorsque la diffusion principale est due aux phonons.

Partant de la formule de KUBO, LUONG et SHAW (39) ont calculé directement la mobilité pour la dispersion sur les impuretés ionisées en considérant les interactions électron-électron comme une faible perturbation. Ils utilisent pour cela, le même potentiel de COULOMB (I.3.31), et représentent le système des n électrons en interaction dans l'approximation à une seule particule de la théorie HARTREE-FOCK indépendante du temps. La formule de BROOKS-HERRING correspond au premier ordre de leur résultat et ils expriment la mobilité résultante par :

$$\mu'_{II} = \mu_{II} \left[1 - \frac{1}{2!} \frac{n}{N_S} + \frac{1}{3!} \left(\frac{n}{N_S} \right)^2 - \frac{1}{4!} \left(\frac{n}{N_S} \right)^3 + \dots \right] \quad (I.3.32)$$

avec n , concentration en électrons libres.

N_S , concentration des centres diffusants.

μ_{II} , mobilité donnée par la formule de BROOKS-HERRING.

Il existe un bon accord entre les résultats des deux calculs cités : les deux méthodes mettent en évidence la réelle influence des collisions interélectroniques dans le cas de la dispersion par les impuretés ionisées.

Dans notre analyse, pour simplifier les calculs numériques, nous supposons que la relation (I.3.32) donnant le changement de mobilité est également valable pour le temps de relaxation. On obtient ainsi, en se limitant au 2ème ordre :

$$\tau'_{II}(\epsilon) = \tau_{II}(\epsilon) \left\{ 1 - \frac{1}{2!} \frac{n(T)}{2N_A + n(T)} + \frac{1}{3!} \left[\frac{n(T)}{2N_A + n(T)} \right]^2 \right\} \quad (I.3.33)$$

avec $\tau_{II}(\epsilon)$, temps de relaxation dû aux impuretés ionisées donné par l'expression (I.3.23).

La valeur de $\tau'(\epsilon)$ ainsi déterminée et utilisée pour le calcul de la mobilité néglige de fait l'influence des collisions entre porteurs sur le facteur de diffusion r_H que nous calculerons au cours du chapitre III, cette influence devant rester faible à priori.

I - 4 - CONDUCTION PAR IMPURETES

Lorsque la température décroît, le nombre d'électrons présents dans la bande de conduction diminue : l'importance relative de la conduction par impuretés augmente en conséquence. Dans les matériaux peu dopés ($N_D < 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), ce processus de conduction se schématise en considérant des transitions thermiquement activées d'électrons entre sites donneurs. Ceci est connu sous l'appellation de conduction "par saut" (ou "hopping") et est caractérisé par une résistivité de la forme :

$$\rho(T) = \rho_3 \cdot \exp\left(\frac{\epsilon_3}{k_B T}\right) \quad (I.4.1)$$

avec ϵ_3 , énergie d'activation du processus.

Le dopage et la compensation d'un semi-conducteur sont les paramètres dont dépend principalement le "hopping" et vont intervenir dans ρ_3 et ϵ_3 .

Lorsque cette énergie d'activation ϵ_3 est nulle, la conduction est de type métallique : c'est le cas des semi-conducteurs très dopés et peu compensés pour lesquels un recouvrement important des fonctions d'ondes des niveaux donneurs a pour conséquence la formation d'une bande d'impuretés (40).

Nous ne décrivons dans la suite que le mécanisme "hopping" : les échantillons retenus sont faiblement dopés et ne présentent pas de conduction de type métallique aux basses températures.

Suggéré dès 1935 par SCHOTTKY, ce mécanisme "hopping" fut l'objet de nombreux travaux théoriques et expérimentaux ; on peut citer, en particulier ceux de CONWELL (41), MOTT (42), MILLER et ABRAHAMS (43) et également TOYABE ET ASAI (44) dans le cas de GaAs. En 1961, MOTT et TWOSE (45) publièrent une revue générale sur la conduction par impuretés. L'agrément n'était toutefois que qualitatif entre les résultats expérimentaux et les prévisions théoriques.

C'est en 1971 que fut repris le traitement de la conduction par impuretés avec l'utilisation des résultats de la théorie de la percolation, et ceci principalement par SHKLOVSKII et EFROS (46), (47).

I-4-1- Expression de ρ_3 en fonction de la concentration N_D

La condition nécessaire pour l'existence de la conduction "hopping" est la présence d'impuretés compensatrices dans le cristal, qui permet la vacance en électrons de certains sites donneurs aux basses températures : dans un matériau de type n, N_A électrons se trouvent piégés sur les centres accepteurs, laissant ainsi N_A atomes donneurs ionisés positivement ; un électron peut alors "sauter" du site où il se trouve sur un site ionisé voisin.

L'homogénéité macroscopique de la concentration en impuretés est la moyenne de la distribution aléatoire de celles-ci qui créent une répartition de potentiel également aléatoire.

L'énergie associée aux états électroniques d'un donneur dépendant du potentiel local qu'il subit, l'ensemble des niveaux donneurs se trouve réparti dans un faible intervalle d'énergie. Le transfert d'un électron nécessite alors l'absorption ou l'émission d'un phonon d'énergie correspondant à la différence énergétique de l'état électronique des sites d'"arrivée" et de "départ".

En considérant deux sites voisins dont les niveaux d'énergie sont ϵ_i et ϵ_j , référés au niveau de FERMI du cristal, la probabilité de "saut" d'un électron du site i vers le site j est notée :

$$\gamma_{ij} = \gamma(\vec{r}_i - \vec{r}_j, \epsilon_i - \epsilon_j) \quad (\text{I.4.2})$$

Considérant des fonctions d'onde électroniques sphériques, AMBEGAOKAR et coll. (48) montrent que γ_{ij} s'exprime par :

$$\begin{aligned} \gamma_{ij} &= \gamma'_{ij}(r_{ij}) \cdot e^{-\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{k_B T}} && \text{pour } \epsilon_j > \epsilon_i \\ \gamma_{ij} &= \gamma'_{ij}(r_{ij}) && \text{pour } \epsilon_j < \epsilon_i \end{aligned} \quad (\text{I.4.3})$$

avec $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$

Chaque donneur étant décrit comme un atome hydrogénoïde, la fonction d'onde de l'électron est de la forme (49) :

$$\psi_i \propto \exp\left(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}_i|}{a_o^*}\right) \quad (\text{I.4.4})$$

dans laquelle a^* désigne le rayon de BOHR de l'état fondamental, calculé à l'aide de l'énergie d'ionisation ϵ_I des donneurs, soit :

$$a_o^* = \frac{\hbar}{(2m^* \cdot \epsilon_I)^{1/2}} \quad (\text{I.4.5})$$

La probabilité de "saut" du site i vers le site j est proportionnelle au carré du module de l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde correspondant aux états de base des sites i et j , soit :

$$\gamma_{ij} \propto \left| \int \psi_i^*(r) \cdot \psi_j(r) \cdot d^3r \right|^2 \quad (I.4.6)$$

ce qui permet d'écrire, en ne considérant que le terme indépendant de l'énergie :

$$\gamma'_{ij} = \gamma_0 \cdot \exp \left(-2 \cdot \frac{r_{ij}}{a_0^*} \right) \quad (I.4.7)$$

MILLER et ABRAHAMS (43) ont montré qu'il est possible de calculer le terme ρ_3 en prenant comme équivalent du système constitué de l'ensemble des donneurs un réseau électrique à 3 dimensions, dont chaque noeud est un atome donneur et pour lequel la conductance g_{ij} entre deux sites est proportionnelle à γ'_{ij} . En général, la conductance des éléments joignant deux sites i et j n'est appréciable que si la distance $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ est faible : la description ne prend donc en compte que les plus proches voisins de chaque centre pour la construction du réseau. On considère alors toutes les chaînes possibles de donneurs joignant deux faces opposées du cristal (cf. fig. I.13)

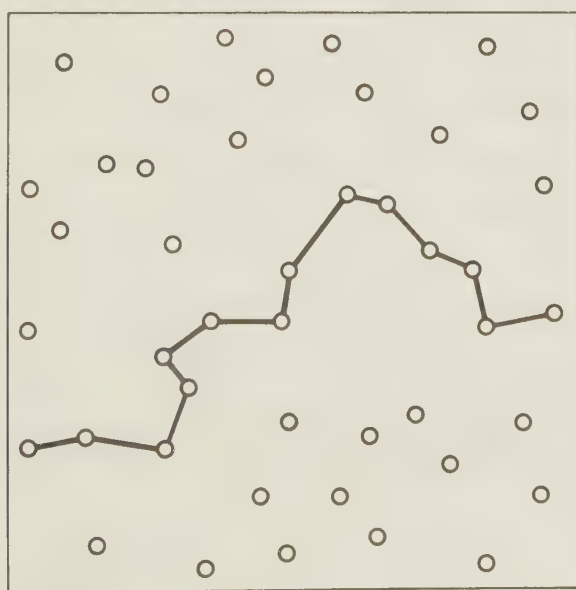


FIG. I.13 Exemple de chaîne formée dans le cristal. Les cercles représentent les atomes donneurs

Définissant chaque chaîne par sa conductance globale G , celles qui possèdent une importante valeur de G "court-circuitent" celles dont la conductance est plus faible. D'autre part la conductance d'une chaîne donnée est principalement due aux éléments de moindres valeurs. Ainsi, l'ensemble du réseau de résistances peut être divisé en trois parties, en se référant à une valeur particulière g_c de la conductance entre deux sites :

- (1) - des zones dans lesquelles les centres sont reliés par des conductances de grande valeur ($g_{ij} \gg g_c$) mais isolées du reste du réseau par d'autres éléments g'_{ij} de valeur quasiment nulle.
- (2) - un petit nombre d'éléments de conductance $g_{ij} \sim g_c$ qui connectent ensemble plusieurs groupes de sites de haute conductance et permettent une liaison électrique entre les deux faces opposées du cristal.
- (3) - le reste du réseau, constitué d'éléments de conductance faible ($g_{ij} \ll g_c$).

De cette description, il ressort que ce sont les éléments de valeur voisine de g_c qui déterminent la conductance de l'ensemble du réseau : les zones décrites en (3) ont une influence négligeable sur la résistance globale ainsi que les zones décrites en (1) même si leurs conductances internes sont très grandes (cf. fig I.14). Cette valeur de conductance g_c , dénommée conductance critique peut être reliée à une distance critique entre sites r_c . En comparant les trois régions précédemment définies, on doit obtenir pour le 1er type de zone tous les r_{ij} très inférieurs à $N_D^{-1/3}$ alors qu'au contraire pour le dernier type les r_{ij} doivent être très supérieurs à $N_D^{-1/3}$. La valeur de r_c doit donc être voisine de la distance moyenne entre donneurs soit de l'ordre de $N_D^{-1/3}$, cependant r_c ne peut être déterminé aisément. Un calcul numérique utilisant la méthode de MONTE-CARLO (50) et portant sur un nombre suffisamment important de sites, donne :

$$r_c = 0,89 \cdot N_D^{-1/3} \quad (I.4.8)$$

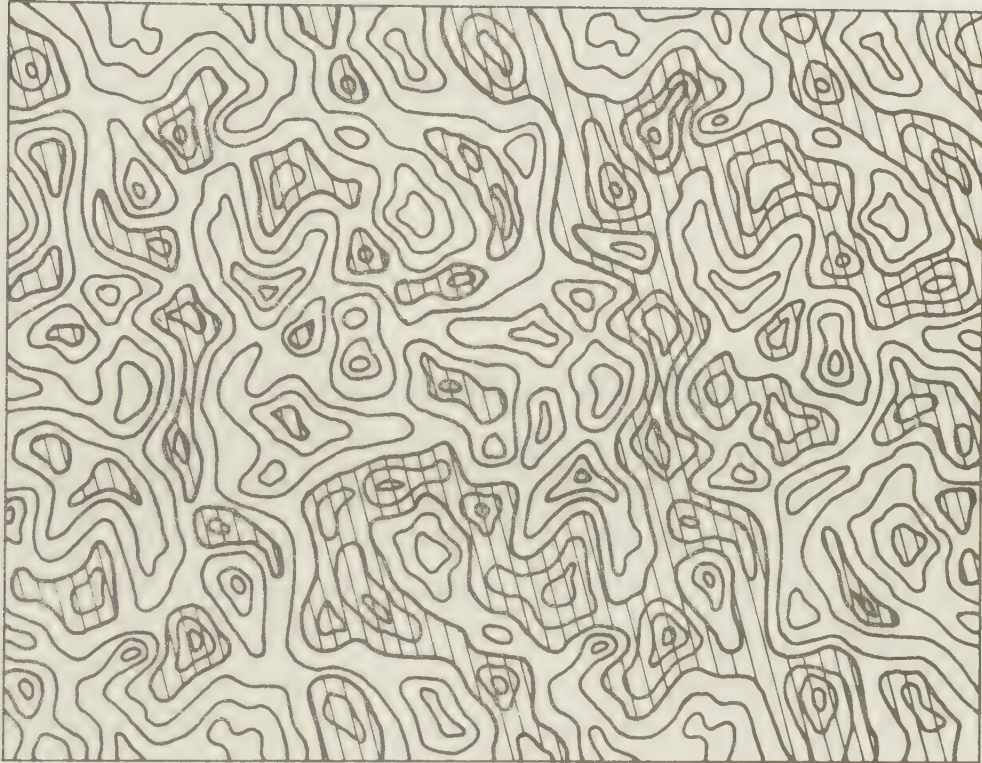


FIG. 1.14 Analogie avec un espace topographique 'inspiré de JALLEN et SCHER (83).
En considérant les zones hachurées (lacs) de faible résistivité et les zones non hachurées (reliefs) de grande résistivité, une "conduction" n'est possible entre deux faces opposées qu'aux endroits où de nombreux chenaux permettent une liaison continue entre les lacs.

soit :

$$\rho_3 = \rho_0 \cdot \exp \left[\frac{1,78}{a_0^* \cdot N_D^{+1/3}} \right] \quad (I.4.9)$$

Le terme ρ_0 ne peut être obtenu avec précision sans la connaissance du nombre exact de chaînes participant réellement à la conduction. Une estimation (51) de la variation de ρ_0 montre qu'il est une fonction faiblement dépendante de N_D :

$$\rho_0 \propto N_D^{\delta/3} \quad (I.4.10)$$

avec $0 < \delta < 0,4$

I-4-2- Expression de ρ_3 en fonction du champ magnétique appliqué

La variation de ρ_3 a été recherchée (49) dans les cas où les fonctions d'onde des atomes donneurs ne sont pas à symétrie sphérique : ce qui est le cas pour certains matériaux comme le germanium et le silicium et pour tous les semi-conducteurs auxquels est appliqué une induction magnétique $\vec{B}$. Dans ce dernier cas, les fonctions d'onde des centres d'impuretés sont allongées dans la direction de $\vec{B}$ et leur recouvrement est fortement réduit dans le plan perpendiculaire.

Pour des champs magnétiques modérés appliqués sur des semi-conducteurs faiblement dopés, c'est-à-dire lorsque les critères suivants sont respectés :

$$\lambda_H > \frac{a_0^*}{(N_D \cdot a_0^{*3})^{1/6}} \quad \text{et} \quad N_D \cdot a_0^{*3} \ll 1$$

où $\lambda_H = \left(\frac{c\hbar}{e \cdot H} \right)^{1/2}$ est la "longueur magnétique", SHKLOVSKII (49) obtient la variation de ρ_3 en fonction du champ magnétique H par la relation :

$$\rho_3(H) = \rho_3(H=0) \cdot \exp \left(\frac{t \cdot a_0^*}{\lambda_H^4 \cdot N_D} \right) \quad (I.4.11)$$

soit encore :

$$\rho_3(H) = \rho_3(H=0) \cdot \exp \left(t \cdot \frac{a_0^* \cdot H^2 \cdot e^2}{N_D \cdot c^2 \cdot h^2} \right) \quad (I.4.12)$$

où t , déterminé par la théorie de la percolation, est voisin de 0,04 (52).

I-4-3- Expression de l'énergie d'activation ϵ_3

- Cas des faibles compensations ($\frac{N_A}{N_D} \ll 1$)

Dans un matériau de faible compensation, très peu de sites donneurs sont ionisés aux basses températures. Le "saut" d'un électron d'un donneur neutre vers un donneur ionisé est équivalent au transfert en sens opposé d'une lacune positive. Les électrons occupant les niveaux donneurs dont les énergies sont les plus faibles, les lacunes ont tendance à se localiser sur les donneurs situés à proximité immédiate des accepteurs ionisés. Cependant, étant donné la répartition aléatoire des centres d'impuretés, il peut se trouver un site accepteur ayant dans son proche voisinage un donneur neutre, un donneur ionisé ou deux donneurs ionisés, ce que EFROS et coll. (47) nomment respectivement les complexes de type 0, de type 1 et de type 2. (Cf. fig I.15). Ces auteurs montrent de plus que les complexes de type 3 ne peuvent exister. Le niveau de FERMI ϵ_F du cristal se situe alors juste au-dessus de l'énergie des états des complexes 0.

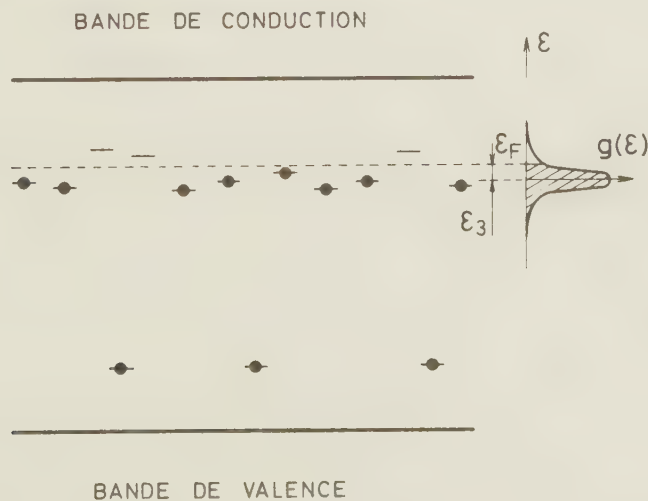


FIG. I.15. Diagramme énergétique dans le cas d'un semi-conducteur peu compensé. De gauche à droite sont représentées des accepteurs formant un complexe de type 2, de type 0 et de type 1. La densité d'états $g(\epsilon)$ est également schématisée.

Les atomes accepteurs étant peu nombreux dans ce cas et situés à grande distance les uns des autres, une lacune pour migrer dans le cristal, doit emprunter plusieurs sites donneurs intermédiaires : l'énergie d'activation nécessaire pour ce mouvement de lacunes doit donc être de l'ordre de l'énergie d'interaction de COULOMB entre un accepteur et un donneur proche, soit $\frac{e^2 \cdot N_D^{1/3}}{\kappa}$. Pour une compensation $K = \frac{N_A}{N_D}$ tendant vers zéro, MOTT (42) a d'ailleurs montré que l'énergie d'activation ϵ_3 pouvait s'écrire :

$$\epsilon_3(K \rightarrow 0) = c \cdot \frac{e^2 \cdot N_D^{1/3}}{\kappa} \quad (\text{I.4.13})$$

avec c , constante numérique.

En tenant compte de l'influence du champ électrique formé par les complexes chargés sur les niveaux de base des donneurs, EFROS et coll. (47) obtiennent :

$$\epsilon_3 = 0,99 \frac{e^2 \cdot N_D^{1/3}}{\kappa} (1 - 0,43 \cdot \nu \cdot K^{1/4}) \quad (\text{I.4.14})$$

où ν est un coefficient numérique estimé égal à 0,7 par la méthode de MONTE-CARLO.

- Cas des fortes compensations ($1 - K \ll 1$)

Pour un semi-conducteur de type n , la concentration des donneurs N_D est alors très légèrement supérieure à celle des accepteurs N_A : aux basses températures, les électrons peu nombreux se répartissent sur les sites donneurs dont les niveaux d'énergie sont les plus "bas" et le niveau de FERMİ ϵ_F se situe à la limite supérieure de ces états occupés (cf. fig I.16).

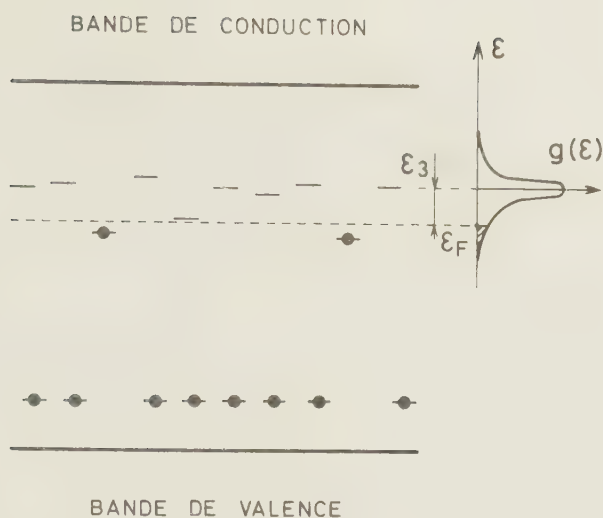


FIG. I.16 Diagramme énergétique dans le cas d'un semi-conducteur très compensé. La densité d'états $g(\epsilon)$ est également schématisée.

Dans une telle situation, les donneurs neutres se trouvent très éloignés les uns des autres (en moyenne de $n^{-1/3}$ avec $n = N_D - N_A$). Pour "sauter" dans le cristal, les électrons doivent acquérir, par l'intermédiaire de phonons, une énergie ϵ_3 correspondant à la différence énergétique entre les niveaux des centres donneurs neutres et ceux des centres donneurs ionisés. En tenant compte de la fluctuation spatiale du potentiel due à la répartition aléatoire des sites d'impuretés, SHKLOVSKII et EFROS (46) obtiennent :

$$\epsilon_3 = v' \cdot \frac{e^2 \cdot N_D^{1/3}}{\kappa} \cdot (1-K)^{-1/3} \quad (\text{I.4.15})$$

où v' doit être déterminé expérimentalement (52).

I-4-4- Conduction "hopping" avec activation thermique variable

Lorsque la température est très basse, la résistivité $\rho(T)$ possède une activation thermique variable qui décroît avec la température. Dans ce cas, l'énergie des phonons disponibles est alors si faible qu'elle détermine le choix de la suite des "sauts" possibles dans le cristal. Seuls, les centres dont le niveau électronique a une énergie très voisine

de celle du niveau de FERMİ peuvent être les "noeuds" du réseau. MOTT a montré (54) que la résistivité suivait alors la loi :

$$\rho(T) = \rho_0 \cdot \exp \left[\left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right] \quad (I.4.16)$$

Ce régime particulier de conduction dénommé quelquefois "conduction MOTT" a été récemment étudié dans InSb fortement compensé (56), ce matériau permettant d'obtenir cette situation à des températures inférieures à 8K.

La gamme de température décrite (de limite inférieure égale à 1,5K) ne nous permet pas d'observer cette variation de l'énergie d'activation du mécanisme "hopping" dans nos échantillons de GaAs : nous ne ferons donc pas intervenir la "conduction MOTT" dans notre analyse.

CHAPITRE II

ETUDE EXPERIMENTALE

L'étude a été effectuée sur des couches de GaAs de type n, épitaxiées en phase liquide sur un substrat monocristallin semi-isolant (10), (59) et provenant de la R.T.C. CAEN. Le substrat de GaAs compensé possède une résistivité toujours supérieure à $10^7 \Omega \cdot \text{cm}$. Les épaisseurs des couches épitaxiées ont été déterminées à l'aide du microscope électronique à balayage du C.N.E.T. LANNION ; après clivage et observation de la tranche de la plaquette, deux techniques de visualisation de la partie épitaxiée ont été choisies :

- l'analyse du courant principal d'électrons qui est très sensible à la différence de résistivité entre le substrat et la couche,
- la cathodoluminescence qui a un grand rendement dans la partie épitaxiée.

Les couches présentées, qui sont toutes parallèles à (100), ont des épaisseurs mesurées allant de 28μ à 75μ . (cf. tableau II.2).

II - 1 - PRINCIPE DE LA MESURE : METHODE DE VAN DER PAUW

La résistivité et la mobilité sont déterminées pour chaque échantillon suivant la méthode de VAN DER PAUW (60), qui ne nécessite dans son principe aucune forme spéciale d'échantillon. Sa bonne application demeure toutefois limitée par la vérification des conditions suivantes (61) :

- l'échantillon doit être homogène (de conductivité constante).
- l'épaisseur doit être constante et de valeur d faible par rapport

aux autres dimensions, ce qui conduit à un échantillon constitué du volume compris entre deux sections droites suffisamment proches d'un cylindre.

- la section droite du cylindre doit être un domaine simplement connexe.

- les contacts électriques, suffisamment petits, doivent être placés à la périphérie de l'échantillon.

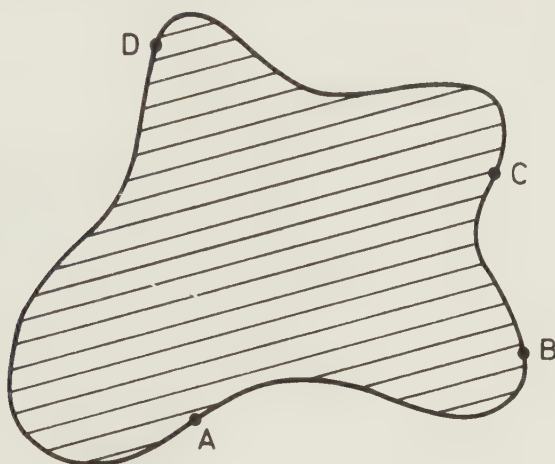


FIG. II.1 Répartition des contacts électriques à la périphérie d'un échantillon de forme quelconque.

Ainsi, la distribution des lignes de courant est la même dans tous les plans parallèles à une section droite. L'échantillon possédant 4 contacts A, B, C et D (cf fig II.1), une résistance de transfert $R_{AB,CD}$ est définie comme étant le rapport de la différence de potentiel $V_D - V_C$ sur l'intensité du courant injecté entre les points A et B.

$$R_{AB,CD} = \frac{V_D - V_C}{I_{AB}} \quad (II.1.1)$$

VAN DER PAUW (60) a montré qu'entre les deux valeurs $R_{AB,CD}$ et $R_{BC,DA}$ existe une relation s'écrivant :

$$\exp \left(\frac{-\pi d R_{AB,CD}}{\rho} \right) + \exp \left(\frac{-\pi d R_{BC,DA}}{\rho} \right) = 1 \quad (II.1.2)$$

dans laquelle ρ représente la résistivité de l'échantillon. Cette relation est la conséquence du fait que dans un matériau de conductivité constante, la distribution du potentiel suit l'équation de LAPLACE $\Delta.V = 0$. La connaissance de $R_{AB,CD}$, $R_{BC,DA}$ et d permet de déduire la résistivité ρ du matériau.

On peut définir de même une résistance de transfert entre contacts croisés $R_{BD,AC}$: le courant est injecté entre B et D et on mesure la tension entre C et A. Celle-ci traduit le "désalignement électrique" des contacts C et A qui ne se trouvent pas a priori sur la même équipotentielle. En appliquant une induction magnétique $\vec{B}$, la variation de cette résistance de transfert $R_{BD,AC}$ correspond d'une part à l'effet de la magnétorésistance et d'autre part à l'effet HALL. En appelant $\Delta R_{BD,AC}$ la partie de cette variation due uniquement à l'effet HALL, la mobilité de HALL s'obtient comme dans le cas d'une sonde classique par l'expression (62) :

$$\mu_H = \frac{d}{B} \cdot \frac{\Delta R_{BD,AC}}{\rho} \quad (\text{II.1.3})$$

II - 2 - ELABORATION DES ECHANTILLONS

II-2-1- Préparation des couches

Les échantillons utilisés sont découpés à la scie à fil sous forme de plaquettes de dimensions 4 x 4 (mm). Après un dégraissage à l'acétone puis un rinçage à l'eau désionisée, ils subissent un décapage de 30 secondes dans une solution tiède de H_2SO_4 (densité 1,8), H_2O_2 (à 110 volumes) et H_2O désionisée dans les proportions 3 : 1 : 1. Deux rinçages, l'un à l'eau désionisée, le second à l'alcool isopropylique terminent le nettoyage des couches.

II-2-2- Réalisation des contacts ohmiques

De nombreux procédés sont proposés dans la littérature pour réaliser des contacts ohmiques sur GaAs. On peut citer entre autres, l'alliage de sphères d'étain sous atmosphère réductrice (63), la soudure par un alliage indium-étain (64) ou l'évaporation successive de couches or-étain-or (65).

A la suite de nombreux essais, une méthode proche de celle proposée par EDWARDS et coll. (66) fut retenue : sur l'échantillon nettoyé, on réalise par évaporation sous un vide inférieure à 10^{-6} torr, un dépôt de l'eutectique Au-Ge (respectivement 88% - 12% en masse) ayant $0,3\text{ }\mu\text{m}$ d'épaisseur sur lequel on évapore ensuite $0,1\text{ }\mu\text{m}$ de nickel. L'échantillon est alors porté à 470°C pendant 20 secondes grâce à une platine chauffante de faible inertie thermique, l'ensemble étant placé sous un balayage réducteur d'hydrogène pur (cf fig II.2).

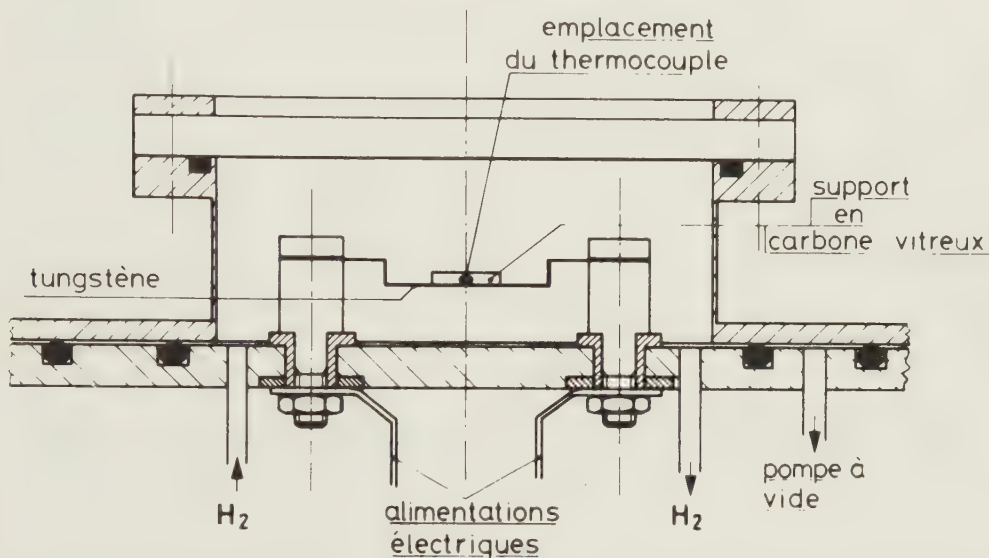


FIG. II.2 Schéma de l'enceinte utilisée pour le traitement thermique d'alliage.

Les contacts réalisés par ce procédé sont ohmiques sur toute la gamme de température utilisée (de l'ambiante à quelques kelvins).

Une nouvelle technique fut récemment proposée par HEIME et coll. (67) : après un décapage en surface de la couche de GaAs par un bombardement d'ions Ar^+ , une préévaporation de 50 Å de nickel est réalisée avant les dépôts successifs de 700 Å d'eutectique AuGe et de 300 Å de nickel. L'avantage de ce procédé est de conduire à des résistances de contact beaucoup plus faibles (dans un rapport 10, cf. fig II.3) pour une gamme de concentration de porteurs à l'ambiante allant environ de 10^{14} à 10^{17} cm^{-3} . Cette diminution de résistance de contact est partiellement attribuée à la technique de décapage par bombardement ionique.

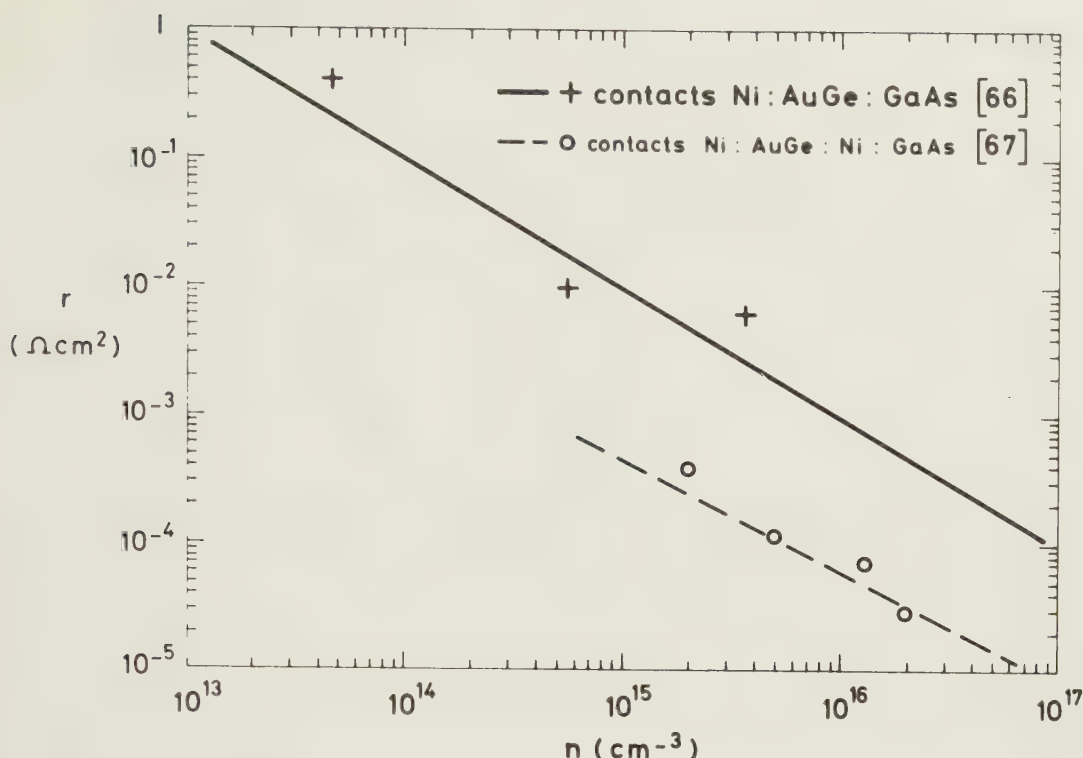


FIG. II.3 Dépendance de la résistance de contact r en fonction de la concentration dans le cas d'un dépôt Ni-AuGe-Ni et Ni-AuGe.

Cependant, nous avons toujours vérifié que les résistances de contact obtenues par notre méthode n'entraînaient aucune erreur appréciable sur les mesures électriques.

Une analyse détaillée des contacts Ni/AuGe/GaAs a été réalisée par ROBINSON (68). L'observation par microscopie électronique montre l'influence du dépôt de nickel sur l'uniformité de la surface du contact (cf fig 14 réf (68)). En l'absence de cette couche, l'eutectique AuGe se regroupe en petits amas lors du traitement thermique d'alliage. L'analyse par spectroscopie AUGER des zones de contact en fonction de la profondeur donne la répartition des différents éléments : cette répartition est reportée sur la figure II.4 qui présente les deux situations, avant et après traitement thermique d'alliage effectué à une température supérieure à 360°C qui correspond à la fusion de l'eutectique AuGe. Après le traitement thermique d'alliage, une accumulation de gallium est trouvée en surface alors que, par diffusion, le nickel a traversé l'eutectique et est venu à l'interface AuGe/GaAs. ROBINSON en conclut d'abord que le rôle du nickel pour l'uniformité du contact n'est pas de couvrir le dépôt AuGe mais qu'il sert de "mouillant" directement

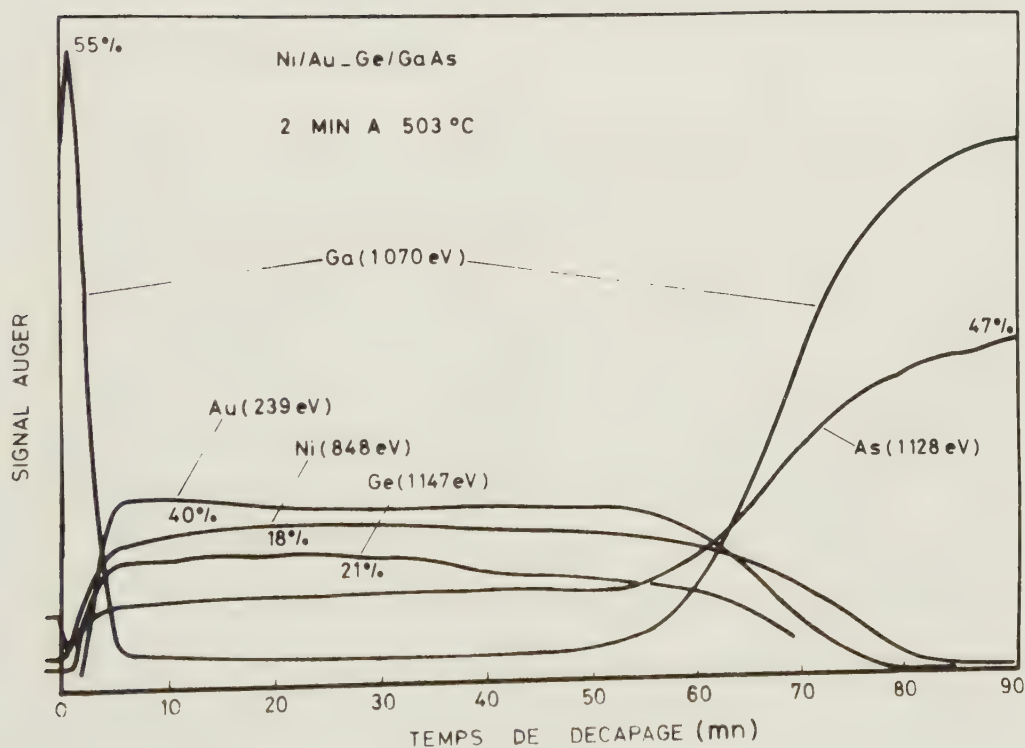
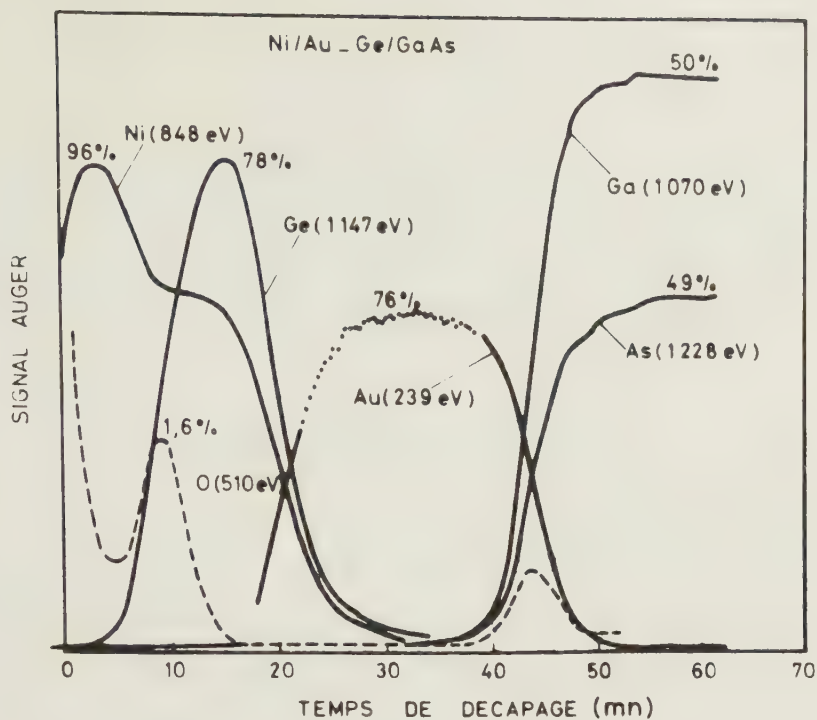


FIG. II.4 Profil de composition d'un dépôt de Ni (170Å) et de Au-Ge (410Å) sur GaAs (d'après ROBINSON (68)).
La vitesse de décapage est de 5 à 15Å/mn. Les valeurs caractéristiques des pics AUGER sont données entre parenthèses pour les différents éléments dont les pourcentages moyens sont précisés localement.
- figure supérieure : avant traitement thermique d'alliage
- figure inférieure : après traitement thermique d'alliage de deux minutes à 503°C.

à l'interface AuGe/GaAs. D'autre part, le germanium jouant le rôle de donneur dans GaAs lorsque l'arsenic est en excès, la présence de lacunes de gallium à l'interface peut faciliter la création d'une couche très dopée n^+ conduisant au comportement ohmique du contact et à sa faible résistance.

II-2-3- Sélection des échantillons

L'utilisation de la méthode VAN DER PAUW suppose l'absence d'inhomogénéités locales dans les couches épitaxiées. Ces défauts internes étant difficilement décelables, un test de qualité des échantillons est basé sur la variation du rapport $\frac{R_{AB,CD}}{R_{BC,DA}}$ en fonction de la température (11), (58). Dans une couche parfaitement homogène, les lignes de courant ne sont pas affectées par les modifications de conductivité conséquentes aux variations de la température. Selon les expérimentateurs, une fluctuation de 5 à 30% de $\frac{R_{AB,CD}}{R_{BC,DA}}$ peut être admise sur la gamme allant des basses températures à l'ambiante. Les échantillons que nous présentons, conduisent à des variations maximales de 10 à 15% dans ces mêmes conditions.

Ce premier test n'est cependant pas sensible lorsque l'inhomogénéité de la couche épitaxiée a lieu en épaisseur c'est-à-dire lorsqu'il existe une stratification de dopage : celle-ci peut apparaître au niveau de l'interface si la transition avec le semi-isolant n'est pas brutale mais également à l'intérieur de l'échantillon si les conditions d'épitaxie évoluèrent au cours de la croissance de la couche. KRAVCHENKO et coll. (69) ont calculé la relation entre la mobilité de HALL à 77 K et à 300 K dans le cas de GaAs pour un cristal homogène (cf fig II.5). Ces mêmes auteurs ont montré que l'inhomogénéité en épaisseur de la couche épitaxiée conduit à une modification de la relation $\mu_H^{77K} = f(\mu_H^{300K})$. Bien que cette caractérisation reste toutefois assez approchée, le report des valeurs expérimentales de mobilité de HALL à 300 K et 77 K de nos échantillons sur la figure II.5 permet d'apprécier l'existence possible de stratifications : à titre de comparaison, nous avons également indiqué sur cette même figure les résultats obtenus par ASAI et coll. (64) et par WHITAKER et BOLGER (70).

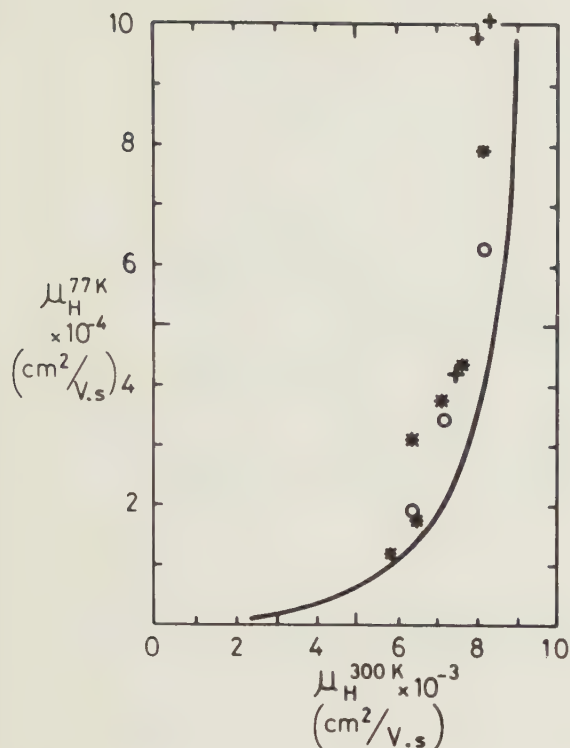


FIG. II.5 Relation calculée entre μ_H^{77K} et μ_H^{300K}
(d'après KRAVCHENKO et coll. (69))
sont représentées également les points expérimentaux
obtenus par ASAI et coll. (64) (*), par WHITAKER et
BOLGER (70) (+) et ceux correspondant à cette étude (0)

Cet examen permet avec le premier test, de considérer comme ayant une bonne homogénéité les couches épitaxiées que nous présentons.

II - 3 - DISPOSITIF EXPERIMENTAL

II-3-1- Le porte-échantillon

Le porte-échantillon à température variable, réalisé en cuivre électrolytique doré, est schématisé sur la figure II.6. Il est conçu pour obtenir de bonnes conditions expérimentales sur toute la plage de température utilisée (de 300 K à 1,5 K). Il se compose principalement des éléments suivants :

- trois ailettes, à la partie supérieure, qui assurent un échange thermique entre l'hélium gazeux et la platine.
- une résistance chauffante de 100 Ω , réalisée en fil de constantan qui permet une dissipation thermique maximale de 4 à 5 watts. Etant alimentée en courant continu, elle est bobinée en "double fil série" à l'intérieur d'un filetage : cette méthode permet d'annuler l'in-

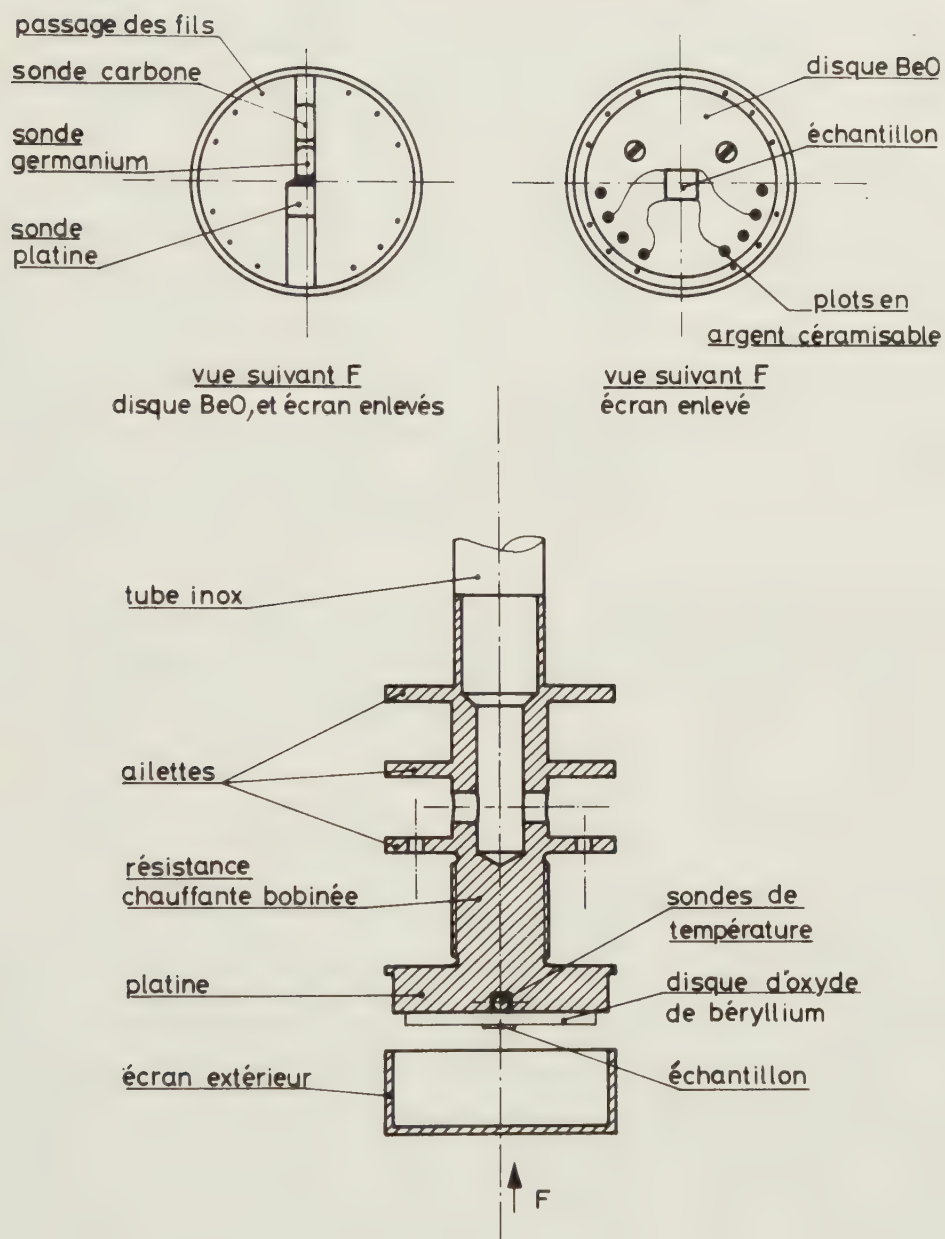


FIG. II.6 Schéma du porte-échantillon.

duction magnétique résultante. L'ensemble est ensuite recouvert d'une couche de vernis GE 7031, améliorant le contact thermique avec le support.

- la platine dans laquelle une entaille centrale permet de loger les diverses sondes de mesure et de régulation de température.

L'échantillon est collé avec de la graisse aux silicones (RP, SI 340) sur un disque d'oxyde de béryllium qui est un excellent isolant électrique et un relativement bon conducteur thermique. Des plots en argent céramisable (HPC, Ag 749) sont disposés à la périphérie du disque de BeO, permettant de connecter aisément l'échantillon à la tête de mesure. De bonnes jonctions thermiques entre la platine, les sondes de température et la plaquette d'oxyde de béryllium sur laquelle est fixé l'échantillon sont assurées par des couches fines de graisse aux silicones (RP, SI 340).

Un écran extérieur, en cuivre, vient s'ajuster sur le pourtour de la tête de mesure et permet de minimiser le gradient thermique dû au rayonnement au niveau de l'échantillon.

II-3-2- L'appareillage cryogénique

Le cryostat utilisé possède 3 enceintes internes, séparées les unes des autres par un "vide" intermédiaire (cf. fig II.6). Un solénoïde supraconducteur longitudinal est disposé dans le réservoir à hélium et produit des inductions magnétiques perpendiculaires aux échantillons. Il est couplé à une alimentation stabilisée en courant pouvant être pilotée par une rampe à vitesse variable. Les "paliers" d'induction magnétique sont obtenus avec une régulation avoisinant 10^{-3} . La valeur de cette induction est déterminée par la mesure de la tension aux bornes d'un shunt de $0,001\Omega$ en série avec la bobine supraconductrice (cf. fig. II.7). La gamme utilisée s'étend de 0 à 15,5 kG.

Le domaine de température considéré est divisé en deux parties, en fonction du système de régulation utilisé :

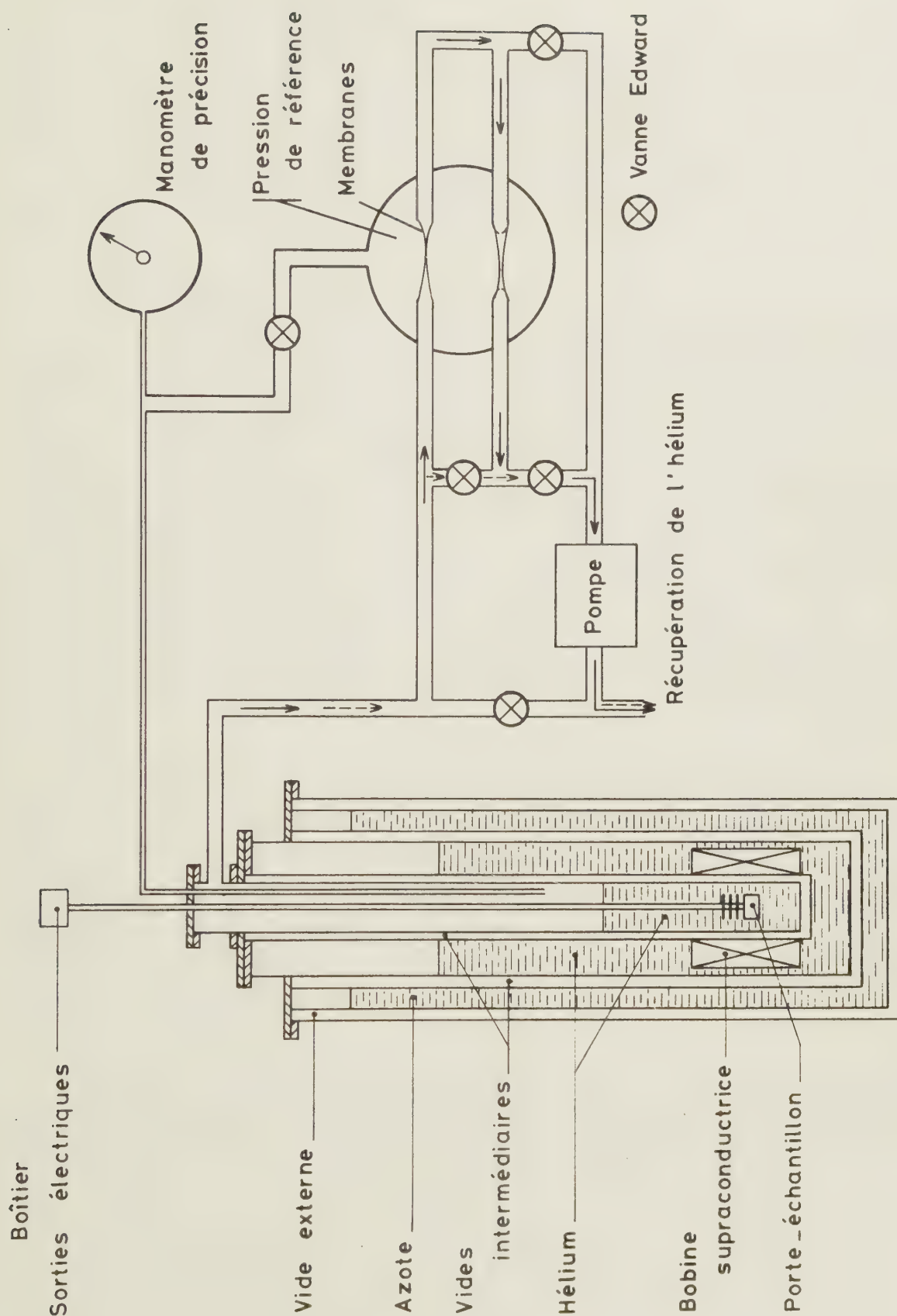


FIG.II.7 Schéma du cryostat et principe de la régulation de température (pour $T < 4,2 \text{ K}$)

- au-dessous de 4,2 K :

L'enceinte centrale du cryostat dans laquelle se trouve le porte-échantillon, est remplie d'hélium liquide. L'abaissement de la température d'équilibre du bain s'effectue par dépression de l'hélium gazeux : une pompe primaire, associée à un système de régulation de pression à membrane souple (cf. fig II.7) permet la stabilisation de la température au centième de degré près entre 4,2 K et 1,5 K.

- au-dessus de 4,2 K :

Le porte-échantillon baigne alors dans l'hélium gazeux froid. La résistance chauffante apporte alors par effet JOULE la puissance nécessaire pour stabiliser la platine à une température donnée : la température est maintenue constante grâce à un asservissement continu dont les transducteurs utilisés sont d'une part une résistance de carbone (type ALLEN-BRADLEY de 1 k Ω à 300 K) pour le domaine de température 4 K - 20 K et d'autre part une résistance de platine de 500 Ω à 300 K pour les températures supérieures ; ces deux sondes sont placées dans l'entaille de la platine du porte-échantillon. Cet asservissement, réalisé par le Service Electronique du département de Physique, permet une stabilité relative des paliers de température comprise entre 10^{-2} et 10^{-3} .

Les mesures des températures comprises entre 1,5 K et 80 K sont effectuées à partir d'une sonde de germanium étalonnée, logée dans la platine à proximité des résistances de régulation. Elle se trouve reliée en permanence à un générateur à courant constant et par un circuit indépendant à un microvoltmètre (technique de mesure à 4 points). Au-dessus de 80 K, la température est donnée par la résistance de platine servant également à la régulation thermique.

Il fut vérifié que l'ensemble des courants de régulation, de chauffage et de détermination de la température n'occasionnait aucune perturbation décelable sur les mesures réalisées sur l'échantillon.

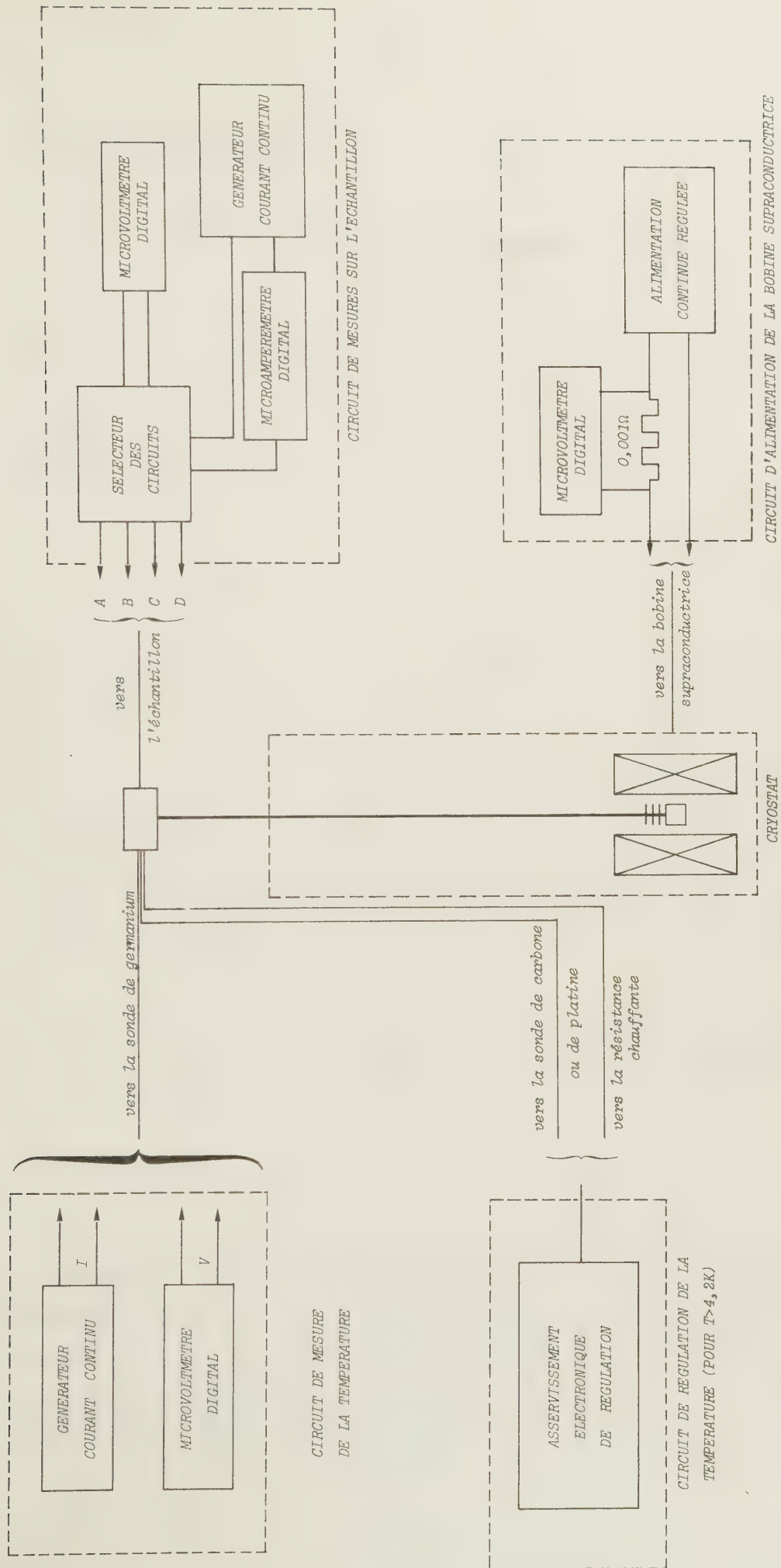


FIG. II. 8 Schéma synoptique du dispositif expérimental.

II - 4 - RESULTATS DES MESURES

II-4-1- Thermalisation de la distribution électronique

Le champ électrique appliqué sur les échantillons est toujours très faible et nettement inférieur à 0,1 V/cm dans la gamme de température décrite. Pour satisfaire à cette condition, l'intensité du courant de mesure est ajustée en fonction de la résistivité de la couche épitaxiée et ainsi la distribution électronique possède la température du réseau. Pour le vérifier, nous calculons le gain d'énergie moyen $\delta\epsilon$ d'un porteur entre deux chocs, soit :

$$\delta\epsilon = \frac{e^2 - E^2}{m^*} \cdot \tau^2(\epsilon) \quad (II.4.1)$$

en identifiant pour cela le temps de relaxation $\tau(\epsilon)$ avec le temps moyen entre deux chocs. Pour tous les échantillons, $\langle\tau\rangle$ est toujours inférieur ou de l'ordre de 10^{-12} seconde. Prenant la valeur du champ électrique la plus élevée soit $E = 0,1$ V/cm et choisissant $\tau = 10^{-11}$ s, le gain d'énergie $\delta\epsilon$ entre 2 collisions est trouvé égal à $2,6 \cdot 10^{-5}$ meV. Cette valeur, très petite devant $k_B T$ (de l'ordre de $8 \cdot 10^{-2}$ meV par degré KELVIN), montre que les électrons sont effectivement thermalisés à la température du réseau. Nous avons par ailleurs vérifié expérimentalement sur les échantillons que le domaine de non-ohmicité se situe pour des valeurs de champ électrique supérieures à 1V/cm.

La puissance électrique maximum injectée dans les échantillons est inférieure à 1 μ W ce qui permet de négliger la différence de température entre la couche épitaxiée et la sonde de mesure.

II-4-2- Mode opératoire

Le courant traversant l'échantillon est délivré par un générateur étalon qui donne des intensités de 10 nA à 100 μ A ; les valeurs des tensions sont relevées à l'aide d'un microvoltmètre digital à haute impédance d'entrée (supérieure à 100 M Ω). Un commutateur "faible bruit" sélectionne les différents circuits courant injecté - tension mesurée nécessaires à la procédure d'utilisation de la méthode VAN DER PAUW.

Les relevés de mesure s'effectuent ponctuellement à chaque température T : pour une valeur donnée d'intensité I , les résistances de transfert $R_{AB,CD}$ et $R_{BC,DA}$ sont obtenues en prenant pour chacune la moyenne des valeurs correspondant aux deux sens de courant. Une résolution numérique programmée de l'équation (II.1.2) donne la valeur de la résistivité $\rho(T)$.

L'utilisation de la relation (II.1.3) permet d'obtenir la mobilité de HALL $\mu_H(T)$: pour un sens donné de l'induction magnétique appliquée $\vec{B}$, la résistance de transfert $R_{BD,AC}(B^+)$ est déterminée par la moyenne des valeurs obtenues pour les deux sens de courant I_{AC} . Cette résistance de transfert $R_{BD,AC}(B^+)$ tient compte à la fois de l'effet de la tension de HALL et de celui dû à la magnétorésistance de l'échantillon. L'inversion de $\vec{B}$ conduit de la même façon au terme $R_{BD,AC}(B^-)$ dans lequel seule la composante due à la tension de HALL change de signe. La demi-différence

$$\left| \frac{R_{BD,AC}(B^+) - R_{BD,AC}(B^-)}{2} \right| \quad \text{définit le terme } \Delta R_{BD,AC} \text{ de l'expression}$$

(II-1-3) dans lequel l'effet de la magnétorésistance est éliminé. Cette procédure est utilisée à chaque température pour plusieurs valeurs de l'induction magnétique $\vec{B}$.

II-4-3- Résultats obtenus

La figure II.9 représente les variations expérimentales de la résistivité $\rho(T)$ pour les trois échantillons présentés. On remarque, aux plus basses températures, un domaine de croissance linéaire de $\lg \rho$ en fonction de $1/T$ caractéristique de la conduction "hopping". Les valeurs de ρ_3 et de l'énergie d'activation ϵ_3 sont données dans le tableau II-1.

Référence échantillon	n°	ρ_3 $\Omega \cdot cm$	ϵ_3 meV
GAE 555	1	2,10	0,121
GAE 586	2	12,5	0,384
GAE 577	3	4,08.10 ²	1,411

TABLEAU II.1

Pour les échantillons n° 2 et n° 3, nous avons représenté sur la figure II.10 la variation relative de résistivité $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ dans la zone où la conduction est du type "hopping" pour différentes valeurs de l'induction magnétique appliquée $\vec{B}$ et en fonction de la température. Dans le cas de l'échantillon n° 1 cette variation $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ est constamment négative dans le même domaine de température pour des valeurs de $\vec{B}$ allant jusqu'à 14-16 kGauss.

Les résultats concernant la mobilité de HALL $\mu_H(T)$ et obtenus aux inductions magnétiques faibles apparaissent sur la figure II.11. Le maximum de μ_H se situe à des températures d'autant plus basses que le dopage en atomes d'impuretés est faible : il se trouve ainsi à 77 K, 71 K et 61 K respectivement pour les échantillons n° 1, n° 2 et n° 3. La figure II.12 montre la variation du rapport $\frac{\mu_H(B)}{\mu_H(B=2,2kG)}$ en fonction de l'induction magnétique $\vec{B}$ pour quelques températures dans le cas de l'échantillon n° 2.

Le terme $n_H(T) = \frac{1}{\rho \cdot e \cdot \mu_H}$ donne une première approche de la concentration électronique : les variations de celui-ci sont représentées sur la figure II.13. Comme nous le voyons au chapitre suivant, la connaissance du facteur de diffusion $r_H(T)$ permet d'atteindre la concentration effective d'électrons libres du matériau $n(T)$ par la relation $n(T) = r_H(T) \cdot n_H(T)$.

Le tableau II.2 regroupe les différentes valeurs de ρ , μ_H et n_H à 300 K, 77 K et 20 K pour les 3 échantillons.

Echantillons	n°	épaisseur μm	300 K			77 K			20 K		
			ρ Ω.cm	μ_H cm ² /V.s	n_H cm ⁻³	ρ Ω.cm	μ_H cm ² /V.s	n_H cm ⁻³	ρ Ω.cm	μ_H cm ² /V.s	n_H cm ⁻³
GAE 555	1	28	0,157	6350	$0,625 \cdot 10^{16}$	0,074	19200	$0,440 \cdot 10^{16}$	0,438	6630	$0,215 \cdot 10^{16}$
GAE 586	2	55	0,912	7210	$0,949 \cdot 10^{15}$	0,227	34600	$0,795 \cdot 10^{15}$	1,51	14880	$0,278 \cdot 10^{15}$
GAE 577	3	75	4,83	8200	$0,157 \cdot 10^{15}$	0,681	61900	$0,148 \cdot 10^{15}$	3,71	35790	$0,470 \cdot 10^{14}$

TABEAU II.2

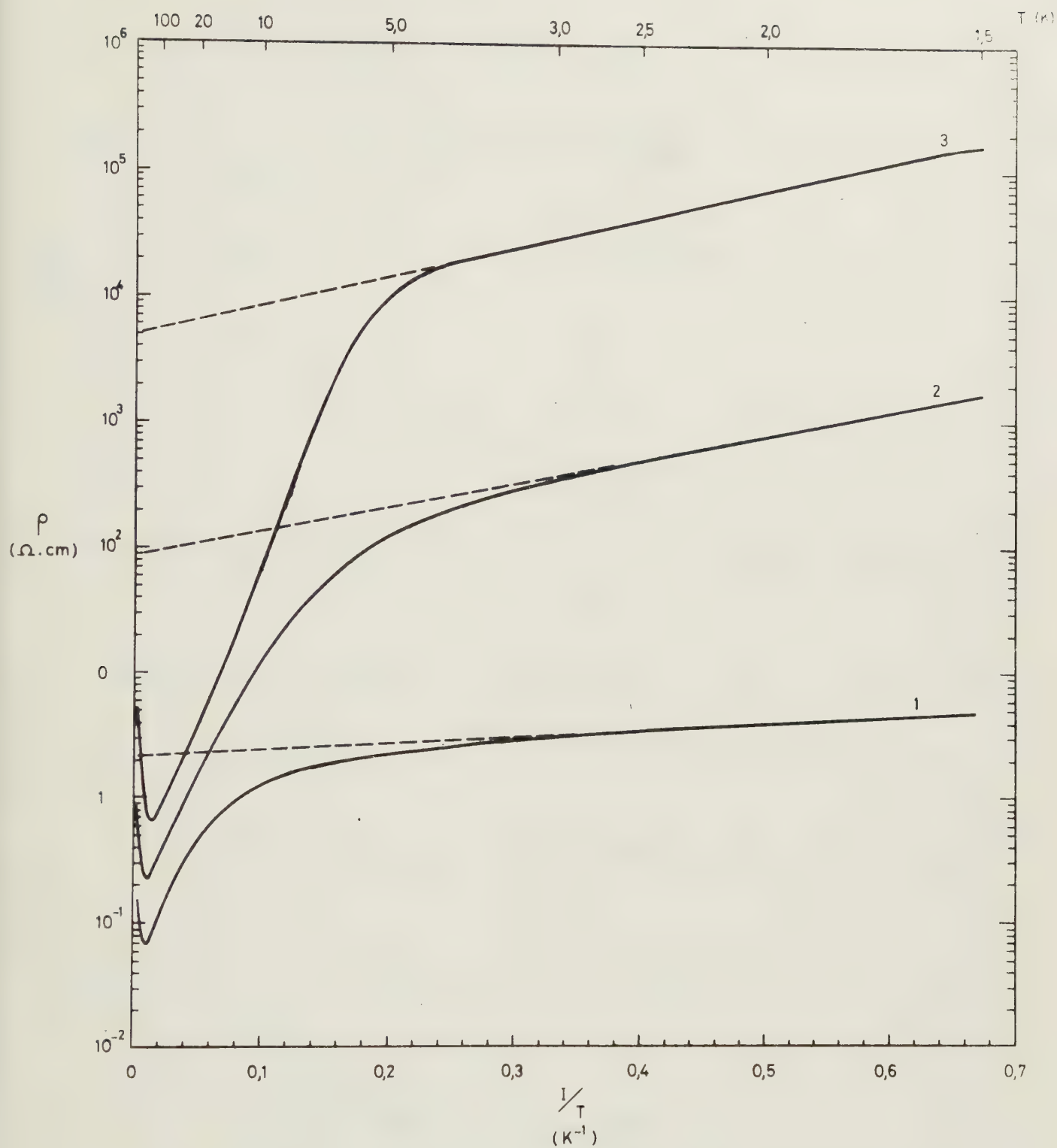


FIG. II.9 Variations expérimentales de la résistivité ρ en fonction de la température T pour les trois échantillons. Les droites en pointillés sont le prolongement de la dépendance linéaire de $\lg \rho$ avec T^{-1} dans le domaine de la conduction "hopping"

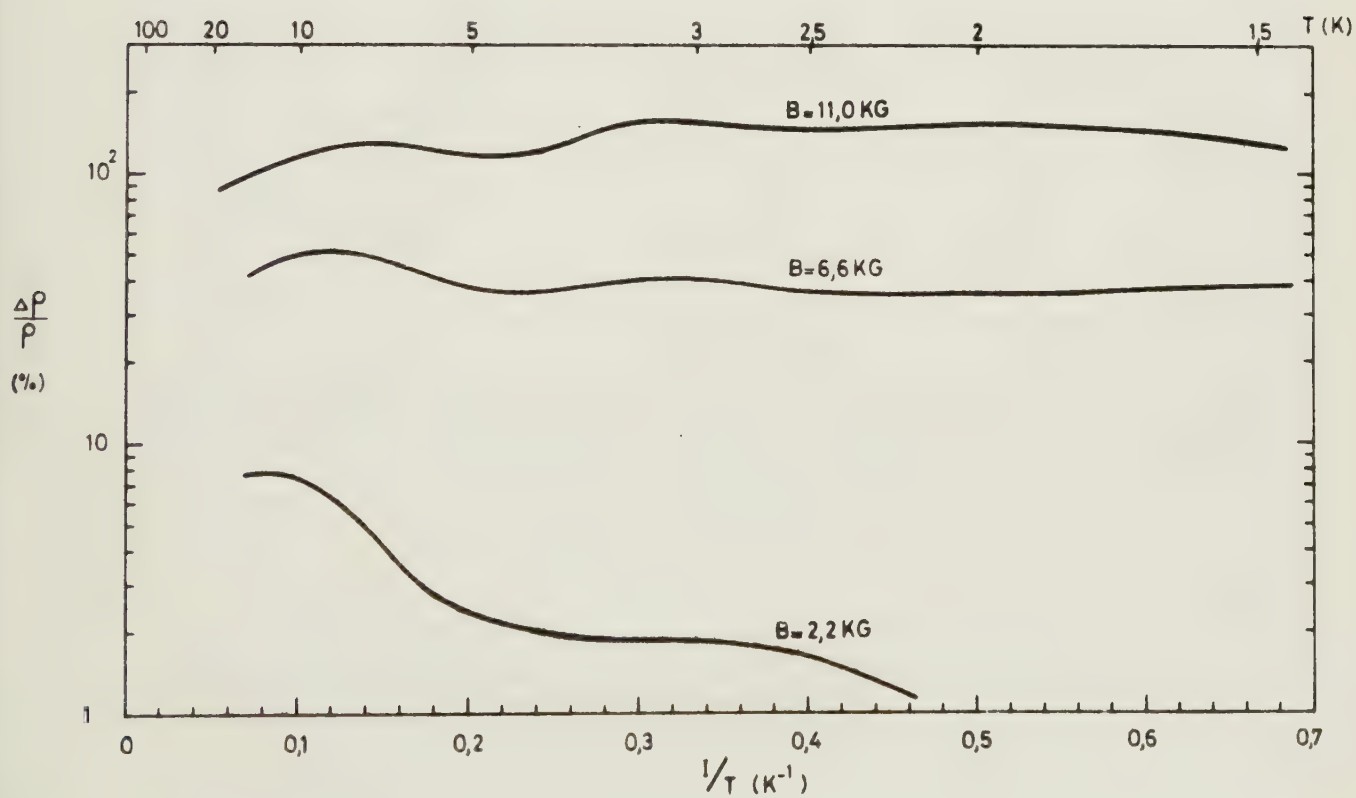
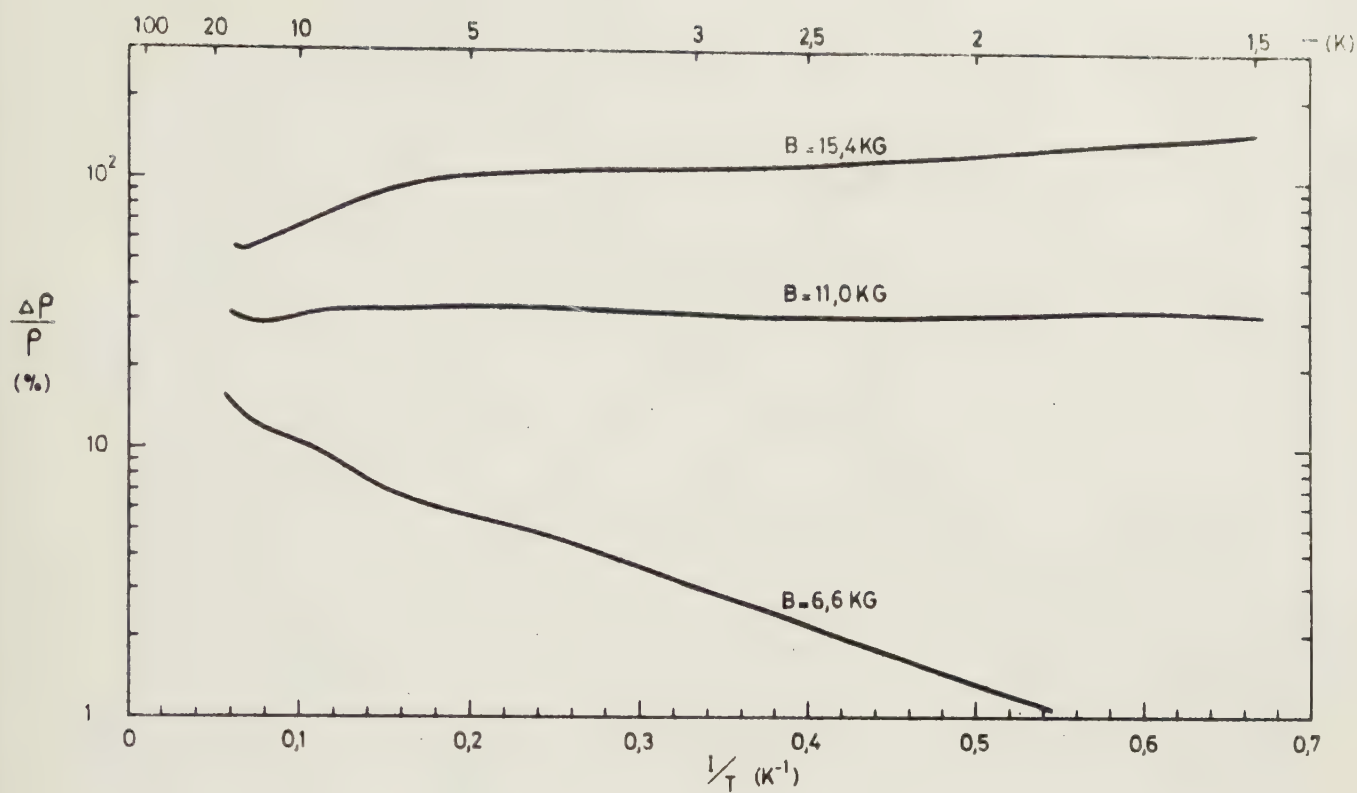


FIG. II.10 Variations expérimentales de $\frac{\Delta p}{p}$ en fonction de la température pour différentes valeurs de l'induction magnétique B . (échantillon n°2 : figure supérieure, échantillon n°1 : figure inférieure)

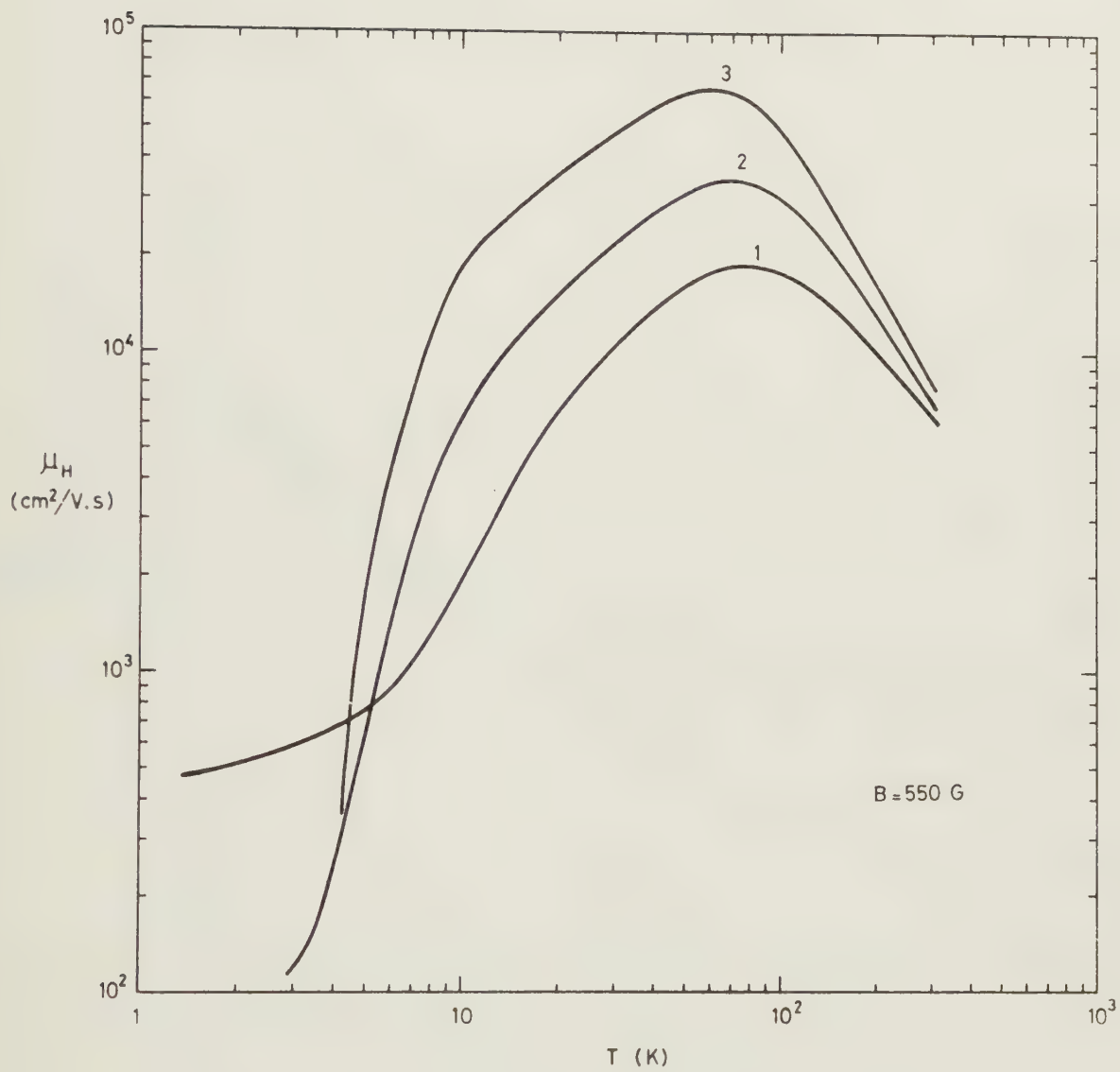


FIG. II.11 Variations expérimentales de la mobilité de HALL μ_H en fonction de la température pour les trois échantillons

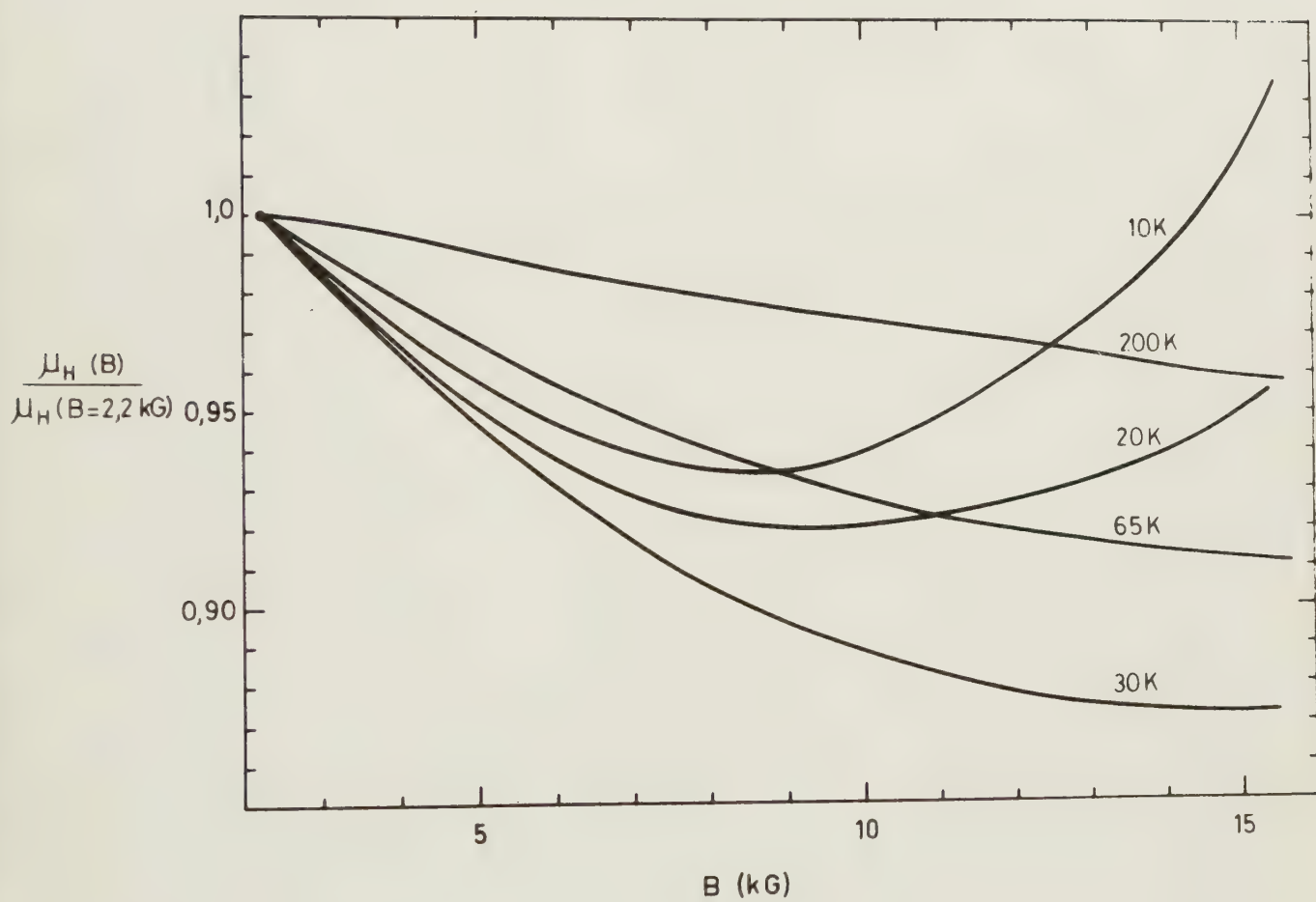


FIG. II.12 Variations relatives expérimentales de la mobilité de HALL μ_H en fonction de l'induction magnétique B dans le cas de plusieurs températures (induction magnétique de référence $B = 2,2 \text{ kG}$)

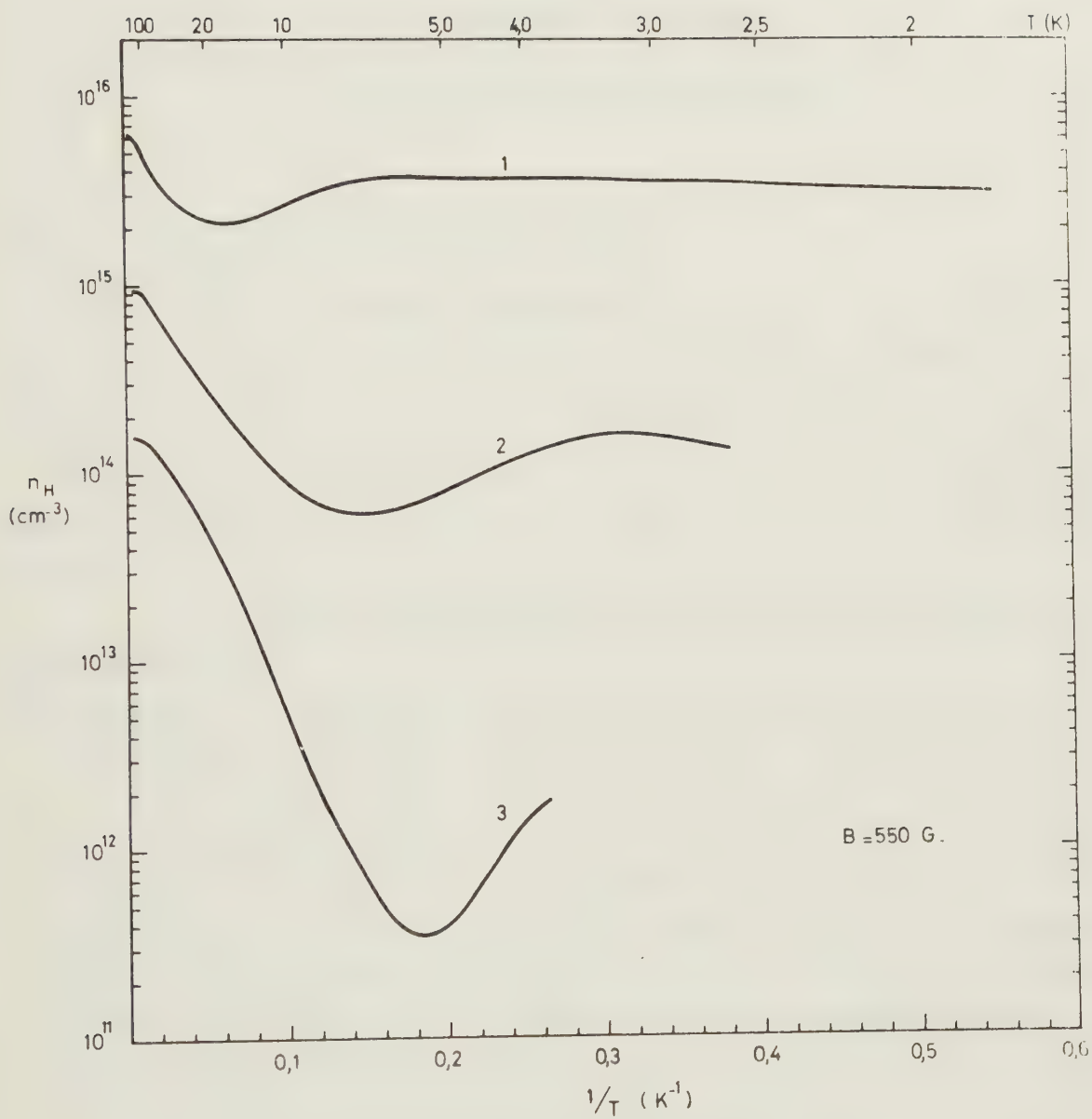


FIG. II.13 Variations expérimentales de la concentration n_H en fonction de la température dans le cas des trois échantillons

CHAPITRE III

ANALYSE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

III - 1 - CARACTERISATION DES ECHANTILLONS

III-1-1- Principe de l'analyse

A partir des valeurs expérimentales obtenues, il importe de caractériser les différents échantillons étudiés, c'est-à-dire de déterminer leurs concentrations N_D en donneurs et N_A en accepteurs ainsi que la valeur ϵ_D de l'énergie d'activation thermique des électrons du niveau d'impuretés vers la bande de conduction. Deux méthodes ont jusqu'à maintenant été utilisées dans ce but :

- l'analyse de la variation de concentration électronique en fonction de la température

Dans la gamme de température où s'ionisent les atomes donneurs, la concentration en électrons libres $n(T)$ est reliée aux valeurs N_D , N_A et ϵ_D par l'équation de neutralité du cristal (relation I.2.11). Pour GaAs, les centres donneurs sont pratiquement tous ionisés à la température ambiante et la différence $N_D - N_A$ est quasiment égale à $n(300K)$. La détermination complète des valeurs N_D , N_A et ϵ_D s'effectue alors généralement en utilisant la méthode des moindres carrés (les résultats retenus sont ceux qui minimisent la somme des carrés des différences entre les valeurs calculées et expérimentales de la concentration électronique sur l'ensemble de la gamme de température analysée).

- l'analyse de la mobilité des électrons libres

La mobilité des porteurs libres dépend des concentrations N_D et N_A de manière significative pour les mécanismes de diffusion sur les impuretés à l'état neutre ou ionisé (cf. chapitre I). Par simplification, la formule de BROOKS-HERRING (relation I.3.23) fut le plus souvent utilisée seule pour la détermination de N_D et N_A , le domaine de température étant choisi en supposant que l'effet des autres processus de dispersion y est négligeable. Connaissant la différence

$N_D - N_A$ à partir de n (300K) comme précédemment, les valeurs de N_D et de N_A choisies sont celles donnant les plus faibles différences entre les valeurs de mobilité calculées à partir de la formule de BROOKS-HERRING (à l'aide des relations I.3.2 et I.3.3) et les valeurs expérimentales.

Les divers auteurs qui ont utilisé ces méthodes (WHITAKER et BOLGER (70), EDDOLLS (11), WOLFE et coll. (58), (27)) ont pris dans tous les cas comme mobilité de conduction la mobilité de HALL. Or, dans la limite des faibles inductions magnétiques et pour un semi-conducteur non dégénéré, la mobilité de HALL μ_H s'exprime par (57) :

$$\mu_H = \frac{e}{m^*} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle} \quad (\text{III.1.1})$$

dans laquelle :

$$\langle \tau^p \rangle = \frac{4}{3 \cdot \pi^{1/2}} \int_0^\infty \tau^p(x) \cdot x^{3/2} \cdot \exp(-x) \cdot dx \quad (\text{III.1.2})$$

En comparant les expressions I.3.2 et III.1.1, il vient alors :

$$\frac{\mu_H}{\mu} = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \quad (\text{III.1.3})$$

où le rapport $\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$, habituellement appelé facteur de diffusion ou facteur de HALL est noté r_H . La valeur de ce terme dépend du mode de dispersion des électrons et de ce fait varie avec la température. Ainsi, si la simplification consistant à considérer r_H égal à l'unité peut encore se justifier lorsque la dispersion est essentiellement due aux modes optiques polaires (l'erreur est dans ce cas de l'ordre de 10 à 15%, cf. (63)) il en va différemment lorsque le processus de diffusion dépend fortement de l'énergie du porteur comme c'est le cas de la dispersion par les impuretés ionisées. La figure III.1 donne pour un cristal de GaAs, les valeurs de $r_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$ calculées à partir du temps de relaxation donnée par la relation de BROOKS-HERRING (I.3.23) en fonction de la température et pour différentes concentrations en impuretés.

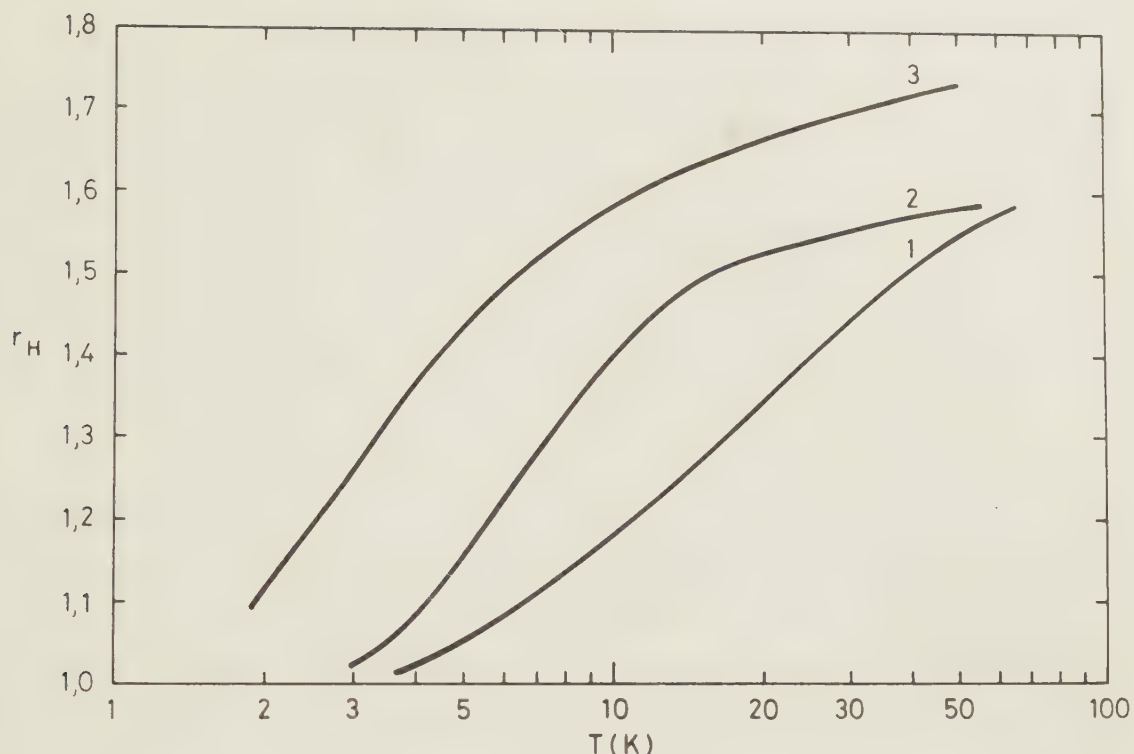


FIG. III.1 Variations du facteur de diffusion r_H calculées pour la dispersion par les centres ionisés (formule de BROOKS-HERRING) dans le cas des trois échantillons.

La concentration effective n en électrons libres étant donnée par $n = \frac{1}{\rho \cdot e \cdot \mu}$, il s'ensuit que la concentration n_H déterminée à partir de la mobilité de HALL par :

$$n_H = \frac{1}{\rho \cdot e \cdot \mu_H} \quad (\text{III.1.4})$$

diffère de n par le facteur de diffusion r_H :

$$\frac{n}{n_H} = \frac{\mu_H}{\mu} = r_H \quad (\text{III.1.5})$$

Les deux méthodes d'analyse citées plus haut utilisent les variations de la concentration en électrons libres ou de leur mobilité dans une zone de température où la dispersion par les impuretés ionisées est importante et, par ce fait, où le facteur de diffusion r_H est assez différent de l'unité (cf. fig.III.1) : il semble donc indispensable de tenir compte des valeurs de r_H pour obtenir une caractérisation correcte des échantillons.

La méthode que nous avons utilisée, de type itératif, permet de déterminer et d'utiliser la valeur du facteur de diffusion r_H , et ses variations dans toute la gamme de température analysée, ce qui à notre connaissance n'a jamais été proposé. Chaque cycle de calcul se compose de deux parties, la première donnant N_D , N_A et ϵ_D à partir des variations de concentration en électrons libres, la seconde évaluant la mobilité de conduction, la mobilité de HALL et le facteur de diffusion.

Le déroulement du 1^{er} cycle est le suivant :

- Prenant $r_H(T) = 1$ on calcule la suite des valeurs de concentration électronique ($n_H = n$) puis à l'aide de l'équation de neutralité et par une méthode de moindres carrés on obtient une première estimation de N_D , N_A , ϵ_D notées $N_D^{(1)}$, $N_A^{(1)}$, $\epsilon_D^{(1)}$. Ces valeurs servent alors à calculer celles des concentrations électroniques notées $n^{(1)calc.}(T)$ qui sont utilisées pour la seconde partie. (Ceci correspond à un lissage de la courbe expérimentale).

- Dans la seconde partie on utilise les valeurs $N_D^{(1)}$, $N_A^{(1)}$ et $n^{(1)calc.}(T)$ pour calculer les divers temps de relaxation correspondant aux différents mécanismes de diffusion. On calcule alors (à partir des relations I.3.1, I.3.3, I.3.2 et III.1.2) $\langle \tau \rangle$ et $\langle \tau^2 \rangle$ et une première estimation de la mobilité de conduction $\mu^{(1)calc.}(T)$, du facteur de diffusion $r_H^{(1)calc.}(T)$ et de la mobilité de HALL $\mu_H^{(1)calc.}(T)$. La liste de $\mu_H^{(1)calc.}(T)$ est alors comparée à celle des valeurs expérimentales de la mobilité $\mu_H^{exp}(T)$.

Si la correspondance n'est pas satisfaisante, un deuxième cycle de calcul est effectué : reprenant les valeurs de $n_H^{exp}(T)$, l'analyse est réalisée cette fois à partir de la liste des valeurs $n^{(2)}(T)$ calculées suivant la relation :

$$n^{(2)}(T) = n_H^{exp}(T) \cdot r_H^{(1)calc.}(T) \quad (III.1.6)$$

L'exploitation de l'équation de neutralité fournit alors une seconde série d'estimations notées $N_D^{(2)}$, $N_A^{(2)}$ et $\epsilon_D^{(2)}$ ainsi que les valeurs "lissées" $n^{(2)calc.}(T)$. La seconde partie du calcul conduit ensuite à $\mu^{(2)calc.}(T)$, $r_H^{(2)calc.}(T)$ et $\mu_H^{(2)calc.}(T)$. Si un autre cycle est jugé nécessaire, l'analyse se poursuit de façon identique en prenant $n^{(3)}(T) = n_H^{exp}(T) \cdot r_H^{(2)calc.}(T)$.

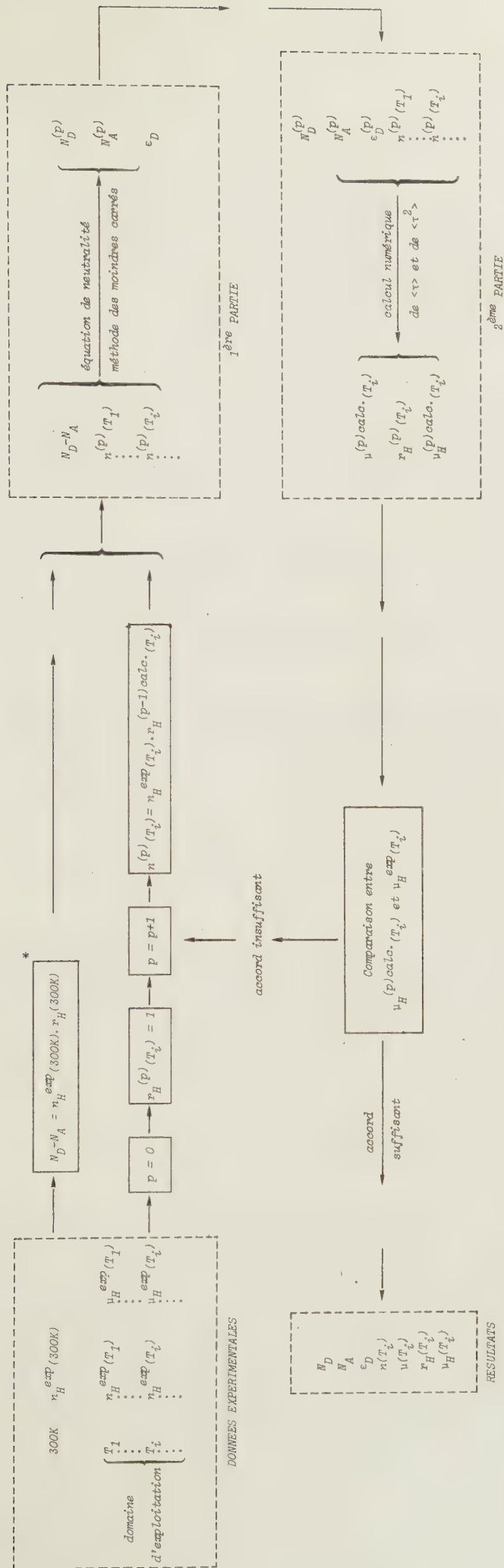


FIG. III.2 DIAGRAMME REPRESENTANT LE SCHEMA DE PRINCIPES DE L'ANALYSE NUMERIQUE

* $r_H(300K)$ est pris égal à 1,12 pour les premiers cycles et est ensuite ajusté au cours des derniers cycles.

Pour comparer, à la fin du $p^{\text{ème}}$ cycle, les séries de $\mu_H^{\text{exp}}(T)$ et $\mu_H^{(p)\text{calc.}}(T)$, il est possible d'introduire une fonction erreur S définie par :

$$S^{(p)} = \sum_T \left[\frac{\mu_H^{\text{exp}}(T) - \mu_H^{(p)\text{calc.}}(T)}{\mu_H^{\text{exp}}(T)} \right]^2 \quad (\text{III.1.7})$$

Le calcul peut ainsi être arrêté lorsque la valeur de $S^{(p)}$ est minimisée.

Un diagramme schématisant le déroulement de cette analyse est présenté sur la figure III.2.

III-1-2- Exploitation numérique

Le traitement numérique dont le principe a été précédemment décrit, appelle un certain nombre de remarques portant notamment sur sa mise en oeuvre et son domaine d'application.

- Evaluation du facteur de diffusion à 300K

La première partie du calcul utilise l'équation de neutralité simplifiée (relation I.2.11) qui, dans le cas de GaAs, s'écrit :

$$\frac{n(T)[N_A + n(T)]}{[N_D - N_A - n(T)]} = 0,4143 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2} \cdot \exp \left[- \frac{\epsilon_D}{0,8616 \cdot 10^{-4} \cdot T} \right] \quad (\text{III.1.8})$$

lorsque les concentrations sont exprimées en cm^{-3} et ϵ_D en eV. Pour réduire d'une unité le nombre des variables de cette relation, il est nécessaire de se fixer la valeur de la différence $N_D - N_A$ qui est pratiquement égale à la concentration en électrons libres à 300K ; on est ainsi conduit à la relation :

$$N_D - N_A = n(300K) = r_H(300K) \cdot n_H(300K) \quad (\text{III.1.9})$$

Certains auteurs ont déterminé expérimentalement la valeur du facteur de diffusion r_H à la température ambiante pour GaAs. Ainsi, HARRIS et SNYDER (71) obtiennent $r_H(300K) = 1,15$ en comparant la concentration en porteurs libres mesurée par effet HALL à celle évaluée par la technique capacitive dans la zone de charge d'espace d'une barrière SCHOTTKY. D'une autre manière, STILLMAN et coll. (63) ont étudié la variation du coefficient de HALL R_H

en fonction du champ magnétique : le rapport $\frac{R_H(B=0,5kG)}{R_H(B=90kG)}$ conduit à la valeur $r_H(300K)=1,15$ également. Par la même méthode, WOLFE et coll. (72) obtiennent $r_H(300K)=1,08$. Nous avons choisi de prendre, pour démarrer le calcul, $r_H(300K)=1,12$: le terme $N_D - N_A$ est ainsi fixé au départ à partir de la donnée expérimentale $n_H^{exp}(300K)$. La valeur de $r_H(300K)$ est ensuite ajustée afin d'obtenir la meilleure concordance possible entre les valeurs mesurées et calculées de la mobilité de HALL. On remarque que ce paramètre $r_H(300K)$ est le seul utilisé pour le calcul en dehors des valeurs des constantes propres au matériau.

- Exploitation de la seconde partie d'un cycle de calcul

La mobilité des électrons libres est limitée par les différents mécanismes de dispersion présentés au chapitre I. Seules sont retenues pour la détermination de la mobilité les diffusions par le potentiel de déformation, par les modes piézoélectriques, par les impuretés ionisées (avec la correction électron-électron) et par les impuretés neutres. Ainsi, dans la relation I.3.1 qui définit le temps de relaxation effectif $\tau(\epsilon)$ et qui s'écrit :

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \sum_i \frac{1}{\tau_i(\epsilon)}$$

les divers temps de relaxation $\tau_i(\epsilon)$ prennent les formes suivantes (en posant $x = \frac{\epsilon}{k_B T}$ et en exprimant les concentrations en cm^{-3}) :

. potentiel de déformation

$$\frac{1}{\tau_{\text{déf}}(x)} = 0,41692 \cdot 10^{20} \cdot \frac{E_1^2}{C_\ell} \cdot \left(\frac{m^*}{m}\right)^{3/2} \cdot T^{3/2} \cdot x^{1/2} \quad (\text{III.1.10})$$

. potentiel piézoélectrique

$$\frac{1}{\tau_{\text{piézo}}(x)} = 0,10524 \cdot 10^8 (h_{14})^2 \cdot \left(\frac{4}{C_t} + \frac{3}{C_\ell}\right) \cdot \left(\frac{m^*}{m}\right)^{1/2} \cdot T^{1/2} \cdot x^{1/2} \quad (\text{III.1.11})$$

. impuretés ionisées.

Pour tenir compte des collisions interélectroniques, le temps de relaxation utilisé τ_{II}' est défini par la relation I.3.33 dans laquelle

l'expression τ_{II} revêt deux formes comme nous l'avons précisé au paragraphe I.3.6. Pour des énergies supérieures à l'énergie de tronquage ϵ_0 , le temps de relaxation τ_{II} s'exprime par la formule de BROOKS-HERRING (relation I.3.23) qui s'écrit :

$$\frac{1}{\tau_{II}(x)} = 2,41432. \frac{[2N_A + n(T)]}{\kappa^2} \cdot \left(\frac{m^*}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot T^{-3/2} \cdot x^{-3/2} \left[\ln(1+b) - \frac{b}{1+b} \right] \quad (\text{III.1.12})$$

$$\text{avec } b = 0,43103.10^{14} \cdot \left(\frac{m^*}{m}\right) \cdot \frac{\kappa}{n^*} \cdot T^2 \cdot x$$

Pour des énergies inférieures à ϵ_0 , le temps de relaxation τ_{II} est pris constant et égal à $\tau_{II}(\epsilon_0)$.

. impuretés neutres

$$\frac{1}{\tau_{IN}} = 0,12246.10^{-6} \cdot \kappa \cdot \left(\frac{m^*}{m}\right)^{-2} \cdot [N_D - N_A - n(T)] \quad (\text{III.1.13})$$

Les constantes numériques employées sont celles qui ont été utilisées dans les travaux récents sur GaAs et en particulier par WOLFE et coll. (27) :

$$h_{14} = 0,141.10^8 \text{ V/cm}$$

$$C_\ell = 0,1438.10^{13} \text{ dyn/cm}^2$$

$$C_t = 0,4904.10^{12} \text{ dyn/cm}^2$$

$$E_1 = 7,0 \text{ eV}$$

Parmi ces constantes le potentiel de déformation E_1 possède la valeur la moins bien définie, celle-ci variant suivant les auteurs entre 6,2 et 7,2 eV.

On calcule alors le temps de relaxation effectif $\tau(\epsilon)$ et sa moyenne sur la distribution électronique (relation I.3.3) :

$$\langle \tau \rangle = \frac{4}{3 \cdot \pi^{1/2}} \int_0^\infty \tau(x) \cdot x^{3/2} \cdot \exp(-x) dx$$

cette valeur permet de calculer μ . Les valeurs du facteur de diffusion r_H et de la mobilité de HALL μ_H sont ensuite obtenues par une seconde intégration numérique donnant $\langle \tau^2 \rangle$.

l'expression τ_{II} revêt deux formes comme nous l'avons précisé au paragraphe I.3.6. Pour des énergies supérieures à l'énergie de tronquage ϵ_0 , le temps de relaxation τ_{II} s'exprime par la formule de BROOKS-HERRING (relation I.3.23) qui s'écrit :

$$\frac{1}{\tau_{II}(x)} = 2,41432 \cdot \frac{[2N_A + n(T)]}{\kappa^2} \cdot \left(\frac{m^*}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot T^{-3/2} \cdot x^{-3/2} \left[\ln(1+b) - \frac{b}{1+b} \right] \quad (\text{III.1.12})$$

$$\text{avec } b = 0,43103 \cdot 10^{14} \cdot \left(\frac{m^*}{m}\right) \cdot \frac{\kappa}{n^*} \cdot T^2 \cdot x$$

Pour des énergies inférieures à ϵ_0 , le temps de relaxation τ_{II} est pris constant et égal à $\tau_{II}(\epsilon_0)$.

. impuretés neutres

$$\frac{1}{\tau_{IN}} = 0,12246 \cdot 10^{-6} \cdot \kappa \cdot \left(\frac{m^*}{m}\right)^{-2} \cdot [N_D - N_A - n(T)] \quad (\text{III.1.13})$$

Les constantes numériques employées sont celles qui ont été utilisées dans les travaux récents sur GaAs et en particulier par WOLFE et coll. (27) :

$$h_{14} = 0,141 \cdot 10^8 \text{ V/cm}$$

$$C_\ell = 0,1438 \cdot 10^{13} \text{ dyn/cm}^2$$

$$C_t = 0,4904 \cdot 10^{12} \text{ dyn/cm}^2$$

$$E_1 = 7,0 \text{ eV}$$

Parmi ces constantes le potentiel de déformation E_1 possède la valeur la moins bien définie, celle-ci variant suivant les auteurs entre 6,2 et 7,2 eV.

On calcule alors le temps de relaxation effectif $\tau(\epsilon)$ et sa moyenne sur la distribution électronique (relation I.3.3) :

$$\langle \tau \rangle = \frac{4}{3 \cdot \pi^{1/2}} \int_0^\infty \tau(x) \cdot x^{3/2} \cdot \exp(-x) dx$$

cette valeur permet de calculer μ . Les valeurs du facteur de diffusion r_H et de la mobilité de HALL μ_H sont ensuite obtenues par une seconde intégration numérique donnant $\langle \tau^2 \rangle$.

Cette méthode néglige la dispersion due aux phonons optiques ce qui limite supérieurement le domaine de température où elle est applicable. La figure I.8 montre en effet qu'à des températures supérieures à 100K, le rôle de la dispersion par les phonons optiques est prépondérant alors qu'il diminue très rapidement lorsque la température décroît. D'autre part, aux basses températures les mesures de résistivité, de mobilité de HALL et de n_H ne traduisent plus uniquement les propriétés de transport des électrons de la bande de conduction car le mécanisme de conduction "hopping" devient appréciable. Ceci oblige à limiter inférieurement en température le domaine d'exploitation. Les échantillons ayant des concentrations en impuretés différentes, l'intervalle d'exploitation est déterminé de manière empirique en comparant les courbes calculées de la mobilité de HALL à celles obtenues à partir des résultats expérimentaux et en conservant que le domaine de températures où leurs variations coïncident. On se trouve de plus guidé dans ce choix par les travaux de WOLFE et coll. (58) qui ont estimé en fonction de la densité totale en impuretés et de la mobilité à 77K, les domaines de température où l'influence de la dispersion par les impuretés ionisées est prépondérante (cf. fig.2 de (58)).

Les mesures de mobilité de HALL doivent être effectuées aux faibles inductions magnétiques. La figure II.12 montre à titre d'exemple l'importante dépendance de μ_H avec B dès que l'induction magnétique dépasse 2kG pour l'échantillon n°2. Pour cet échantillon la valeur de μ_H à 10kG diffère, à 30K, de celle à 2,2kG de 11% et ceci correspond à la même différence relative sur r_H . Les données expérimentales de μ_H que nous avons utilisées pour cette analyse ont été obtenues pour une induction magnétique de 550 Gauss ce qui assure d'être réellement dans le domaine des "champs magnétiques faibles".

III-1-1- Résultats obtenus

La succession continue des cycles de calcul décrite précédemment ne fut pas réalisée car afin de limiter au maximum le temps de travail de l'ordinateur, chaque cycle fut traité indépendamment : à partir des variations de N_D , N_A , ϵ_D , r_H et μ_H obtenues dès les premières séquences, il a été possible de choisir empiriquement des valeurs de ces paramètres voisines

des valeurs finales. Ceci a permis d'éliminer une grande partie des séquences intermédiaires et seuls les calculs des premiers et derniers cycles ont été effectués sur l'ordinateur (C.I.I. 10070 du C.I.C.B).

Le tableau III.1 ci-dessous regroupe les différents résultats obtenus pour les trois échantillons :

Réf. échantillons	n°	N_D cm ⁻³	N_A cm ⁻³	ϵ_D eV	$N_D - N_A$ cm ⁻³	$N_D + N_A$ cm ⁻³	K
GAE 555	1	$0,762.10^{16}$	$0,147.10^{16}$	$0,106.10^{-2}$	$0,615.10^{16}$	$0,909.10^{16}$	0,19
GAE 586	2	$0,303.10^{16}$	$0,189.10^{16}$	$0,213.10^{-2}$	$0,114.10^{16}$	$0,492.10^{16}$	0,62
GAE 577	3	$0,881.10^{15}$	$0,692.10^{15}$	$0,347.10^{-2}$	$0,189.10^{15}$	$0,157.10^{16}$	0,76

TABIEAU III.1

La figure III.3 représentant les variations expérimentales de μ_H et celles calculées en fin d'exploitation précise l'intervalle d'utilisation de cette méthode pour chaque échantillon étudié : ainsi, l'analyse fut réalisée entre 35K et 55K pour le n°1, entre 22K et 38K pour le n°2 et entre 10K et 20K pour le n°3. On remarque que le domaine de calcul se trouve déplacé vers les plus basses températures lorsque la concentration totale en impuretés diminue : on s'aperçoit sur la figure I.8 d'une part que plus la diffusion par les centres neutres et ionisés est grande plus la température à laquelle les phonons optiques peuvent être négligés est élevée. D'autre part, la figure II.9 montre de son côté que l'effet de la conduction "hopping" commence à se faire sentir à des températures d'autant plus élevées que le dopage est important.

Les écarts maxima entre les valeurs expérimentales de la mobilité de HALL et celles calculées dans le domaine de température considéré sont inférieurs à 2% en ce qui concerne les échantillons n°2 et n°3 ; ceci

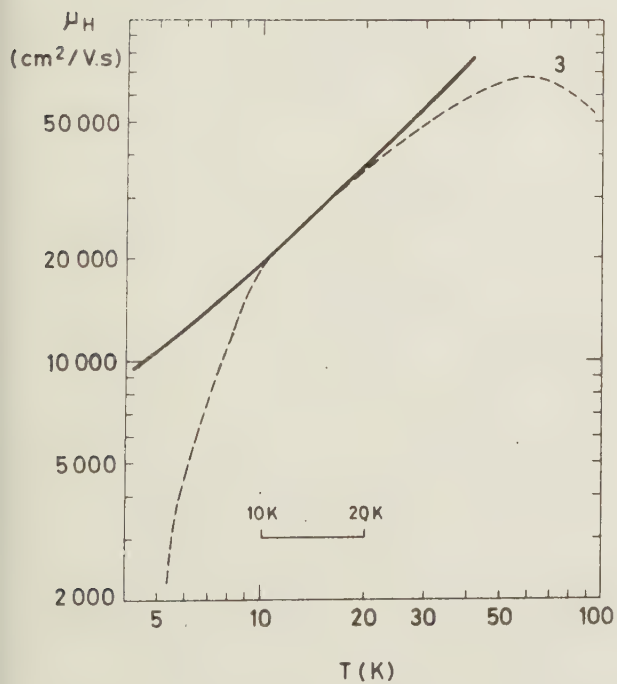
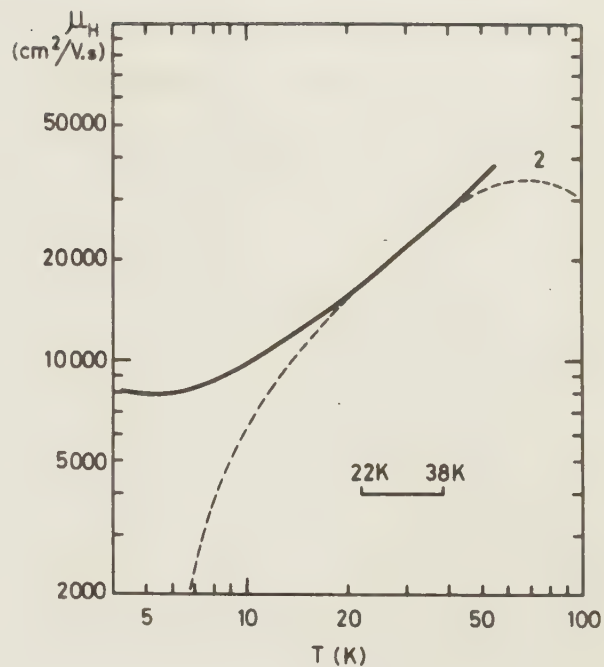
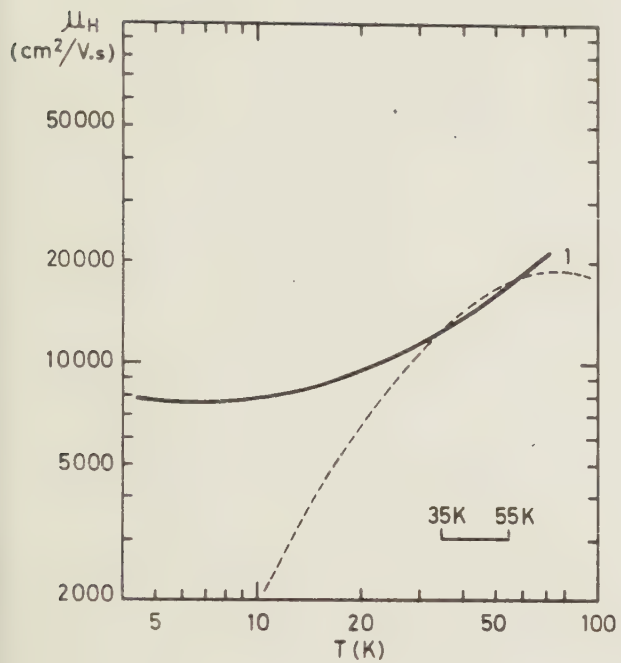


FIG. III.3 Variations en fonctions de la température T de la mobilité de HALL expérimentale (trait pointillé) et de la mobilité de HALL calculée (trait plein) pour les trois échantillons. La zone d'analyse numérique est précisée dans chaque cas.

correspond à un très bon accord entre valeurs expérimentales et calculées. Compte tenu d'une incertitude relative de 5% sur les mesures d'épaisseur des couches épitaxiées, l'incertitude relative correspondant aux données expérimentales utilisées est inférieure à 10%. Les résultats retenus pour N_D , N_A et ϵ_D ont une précision qui ne dépend pratiquement que de celle des valeurs expérimentales et qui est estimée ainsi entre 5 et 10%.

L'échantillon n°1, plus dopé que les autres, n'a pas permis une aussi bonne concordance entre les résultats calculés et mesurés (cf. fig.III.3) et sa caractérisation reste donc la moins précise : ainsi l'écart maximum se situe à 8% pour la mobilité de HALL. Dans ce cas, les hypothèses considérées sont probablement moins bien vérifiées que pour les autres échantillons et il n'existe pas de domaine de température où la dispersion par les phonons optiques d'une part et l'effet de la conduction "hopping" d'autre part peuvent être totalement négligés. Nous donnons de plus au paragraphe III.2 une autre explication possible pour cette différence entre les valeurs expérimentales et celles calculées.

Les concentrations en électrons libres déterminées pour chaque échantillon à partir des résultats N_D , N_A et ϵ_D obtenus (cf. tableau III.1) sont reproduites en fonction de l'inverse de la température sur la figure III.4. La comparaison entre les figures III.4 et II.13 met en évidence l'effet de la conduction "hopping" sur les mesures de n_H aux basses températures.

III - 2 - DISCUSSION DES RESULTATS CONCERNANT LA CONDUCTION PAR LES

ELECTRONS LIBRES

III-2-1- Discussion concernant la mobilité

Dans le calcul de la mobilité, nous avons fait intervenir d'une part l'effet des interactions interélectroniques et d'autre part, nous avons tenu compte de la limite de l'approximation de BORN en utilisant tout en les simplifiant, les résultats obtenus par BLATT (cf. chapitre I). Cette méthode n'avait, à notre connaissance, jamais été utilisée jusqu'alors pour étudier les phénomènes de conduction aux basses températures. Il est important d'examiner maintenant l'effet sur les résultats de cette description plus élaborée.

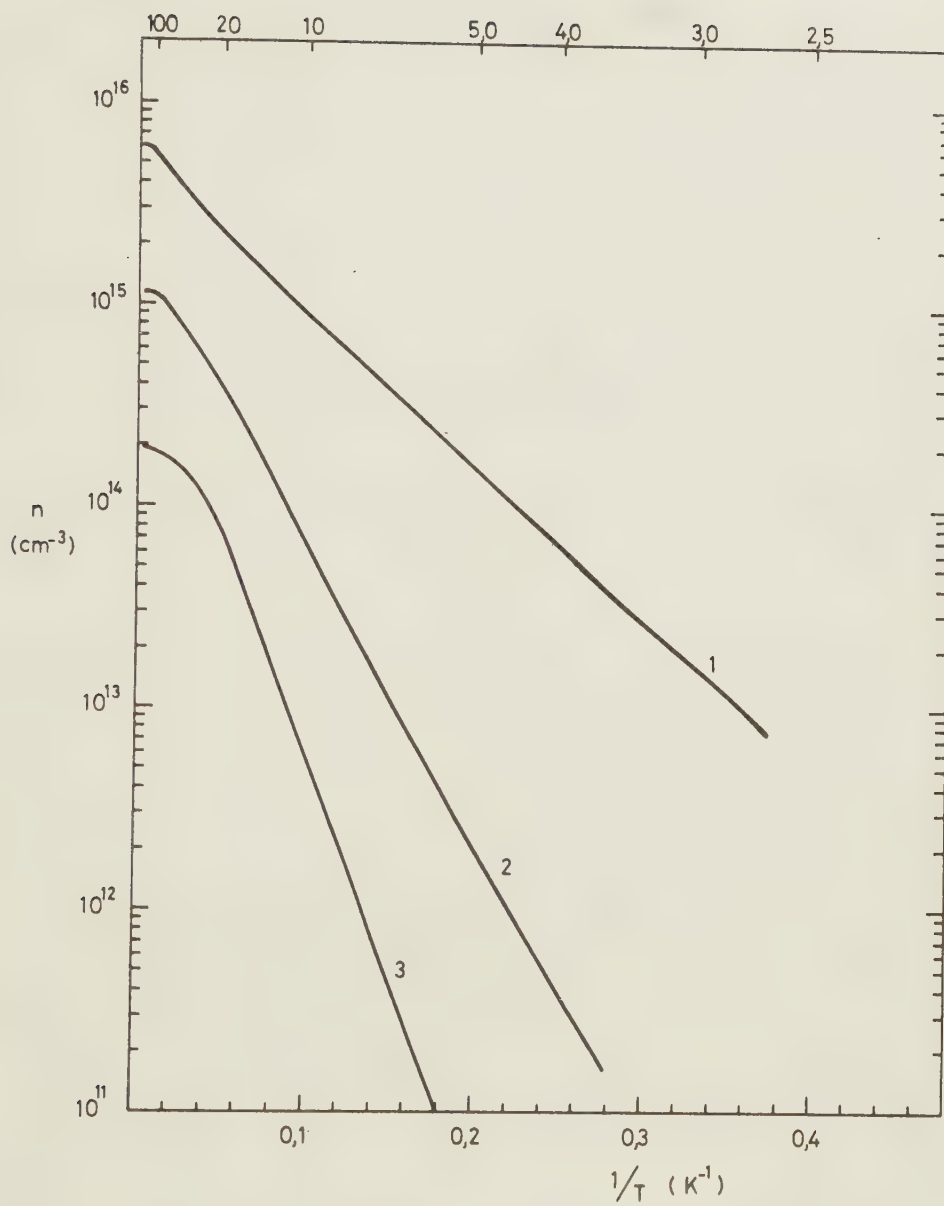


FIG. III.4 Variations avec la température T de la concentration en électrons libres calculée pour les trois échantillons.

- Collisions interélectroniques :

Le type de correction choisi et présenté au paragraphe I.3.10 est appliqué au temps de relaxation $\tau_{II}(\epsilon)$ correspondant à la dispersion par les impuretés ionisées. Il suppose que l'effet des interactions électron-électron est une faible perturbation par rapport à l'interaction électron-centre ionisé. La figure III.5 illustre les modifications ainsi apportées à la mobilité de conduction $\mu_{II}(T)$ calculée directement à partir de la formule de BROOKS-HERRING (relation I.3.23) dans le cas des trois échantillons : la correction est d'autant plus importante que la concentration en électrons libres est grande, et donc augmente lorsque la température croît.

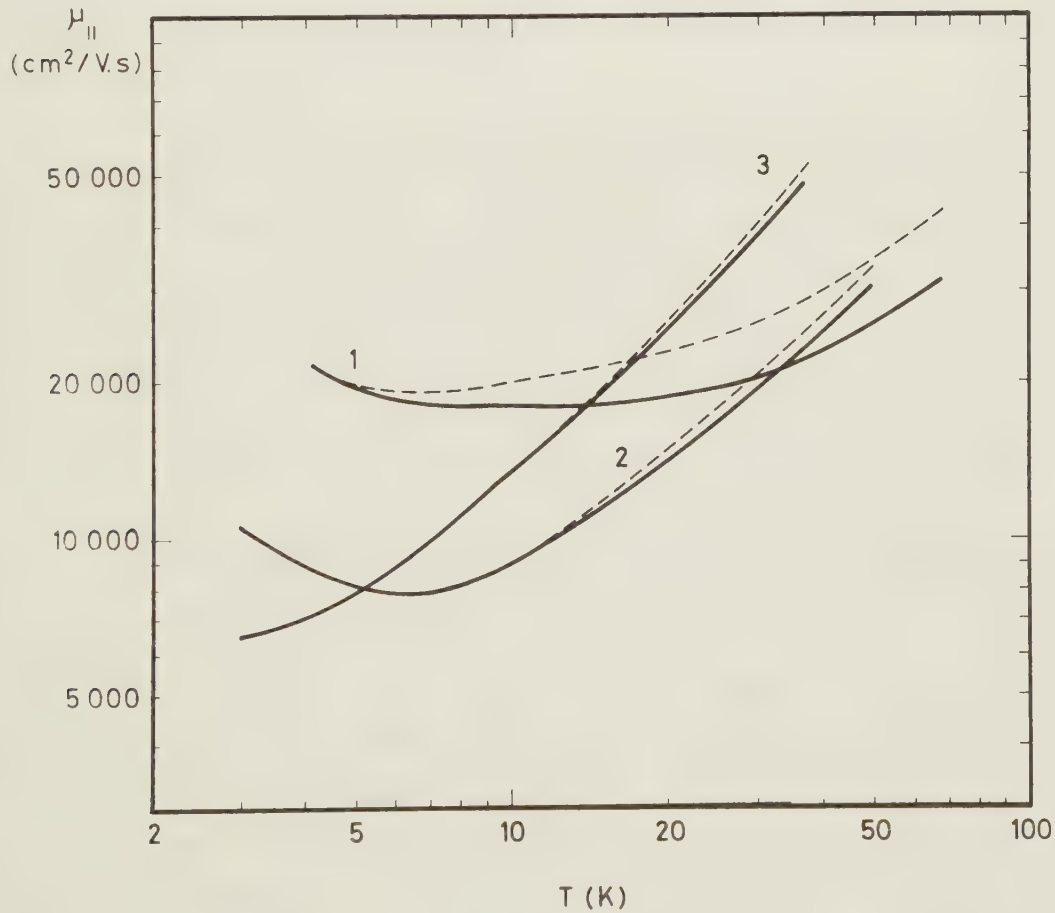


FIG. III.5 Influence de la correction due aux interactions interélectroniques sur la mobilité μ_{II} calculée pour la dispersion par les impuretés ionisées (formule de BROOKS-HERRING). La courbe en trait plein représente les variations de μ_{II} en tenant compte de ces interactions, la courbe en trait pointillé est obtenue dans le cas où ces interactions sont négligées.

Par exemple, à 20K, les collisions interélectroniques ont pour effet de diminuer la mobilité μ_{II} de 18,2% pour l'échantillon n°1, 4,3% pour le n°2 et 2,5% pour le n°3. La première valeur obtenue (éch. n°1) est trop importante pour que l'on puisse considérer l'interaction électron-électron comme faible : la description retenue tend à devenir inadéquate pour l'échantillon n°1 et peut expliquer le décalage constaté entre les courbes expérimentale et calculée pour la mobilité de HALL au § III.1.3.

On constate donc que si la prise en compte de l'interaction électron-électron conduit à des résultats en bon accord avec les valeurs expérimentales pour des concentrations en électrons libres inférieures à 10^{15} cm^{-3} , il apparaît nécessaire de recourir à une autre description lorsque la densité en électrons libres dépasse 10^{15} cm^{-3} . D'autre part, cette correction devient négligeable lorsque la concentration en électrons libres est inférieure à $5.10^{13} \text{ cm}^{-3}$ (cf. fig. III.5).

Il est intéressant de mettre en évidence l'influence des interactions interélectroniques sur la mobilité de conduction globale, c'est-à-dire en ayant tenu compte également des dispersions par le potentiel de déformation, par les modes piézoélectriques et par les impuretés neutres : nous obtenons alors 9,3% pour l'échantillon n°1, 3,6% pour le n°2 et 2,3% pour le n°3 à la température de 20K. La grande diminution de l'effet des collisions interélectroniques dans le cas de l'échantillon n°1 résulte de l'efficacité marquée de la diffusion par les impuretés neutres (cf. fig. I.8).

- Interaction électron-centre ionisé aux basses températures

Nous avons rappelé au paragraphe I.3.6 les limites de l'approximation de BORN dans le cas de la diffusion par les centres ionisés et proposé une méthode qui utilise les travaux de BLATT en schématisant, aux faibles énergies, les courbes de la section efficace de diffusion totale par des droites de pente $-1/2$ (cf. fig. I.11). Le temps de relaxation τ_{II} est ainsi calculé avec la formule de BROOKS-HERRING (relation I.3.23) pour les porteurs dont l'énergie est supérieure à ϵ_0 et pris constant et égal à $\tau_{II}(\epsilon_0)$ pour les porteurs dont l'énergie est inférieure à ϵ_0 . Aux basses températures la meilleure approche des résultats de BLATT par des droites de pente $-1/2$ apparaît pour une valeur de k'^2 égale à 1 ce qui correspond à $\epsilon_0 = 0,734 \text{ meV}$ (cf. fig. I.11).

La figure III.6 montre l'effet du choix de l'énergie de tronquage ϵ_0 sur la mobilité μ_{II} dans le cas de l'échantillon n°2 où les différentes valeurs de ϵ_0 prises sont : $\epsilon_0 = 0$ (approximation de BORN), $\epsilon_0 = 0,513$ meV ($k'^2 = 0,7$), $\epsilon_0 = 0,734$ meV ($k'^2 = 1$) et $\epsilon_0 = 0,954$ meV ($k'^2 = 1,3$). On remarque ainsi que, pour des températures inférieures à 10K, la valeur de la mobilité μ_{II} calculée en tenant compte du "tronquage" est supérieure à celle calculée dans l'approximation de BORN : à titre d'exemple, à 5K, l'écart relatif est de 1,2% pour $k'^2 = 0,7$, 4,3% pour $k'^2 = 1$ et 9,5% pour $k'^2 = 1,3$.

Ayant choisi $k'^2 = 1$, nous avons porté au tableau ci-dessous l'écart relatif entre les valeurs de mobilité μ_{II} calculées en utilisant le tronquage d'une part et l'approximation de BORN d'autre part, et ce pour les trois échantillons. On remarque évidemment que cet écart croît rapidement lorsque la température diminue.

Référence échantillon	n°	Ecart relatif ($k'^2=1,0$) $\frac{\Delta\mu_{II}}{\mu_{II}}$ $T=4,2K$	Ecart relatif ($k'^2=1,0$) $\frac{\Delta\mu_{II}}{\mu_{II}}$ $T=7,0K$
GAE 555	1	0,6 %	0,9 %
GAE 586	2	5,3 %	2,5 %
GAE 577	3	12,2 %	3,1 %

On s'attend dans le domaine des basses températures où la diffusion par les impuretés ionisées est prépondérante à retrouver pratiquement les mêmes écarts sur les valeurs de la mobilité de conduction globale μ ; ainsi, à 4,2K, l'écart reste de 12,1% pour l'échantillon n°3 et 4,9% pour l'échantillon n°2. Cependant quand l'efficacité de la dispersion par les impuretés neutres devient appréciable cet écart se trouve notablement réduit comme on le remarque pour l'échantillon n°2 où il vaut 0,2% à 4,2K.

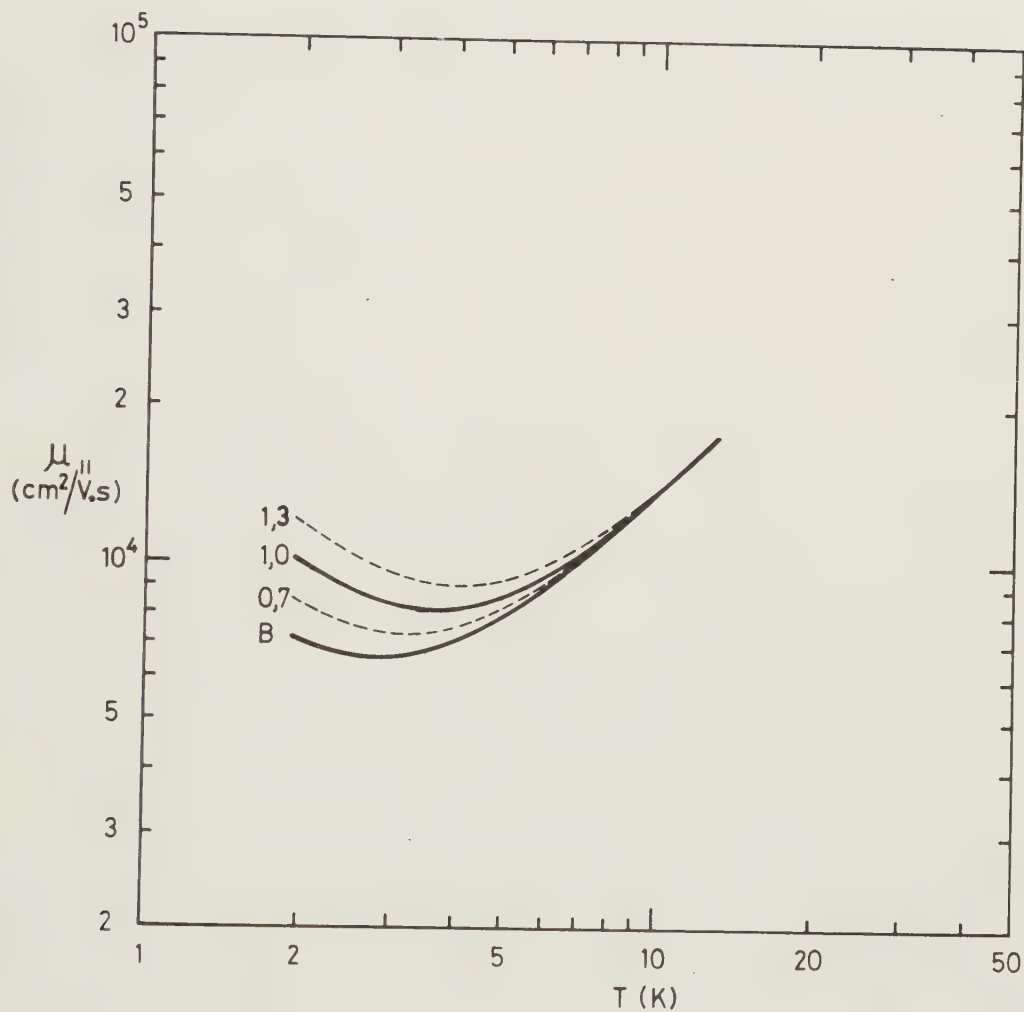


FIG. III.6 Influence du choix de l'énergie de tronquage ϵ_0 sur le calcul de la mobilité μ_{II} due à la dispersion par les impuretés ionisées (cas de l'échantillon n°2)

"B" : calcul de μ_{II} dans l'approximation de BORN (formule de BROOKS-HERRING)

"0,7" : calcul avec $\epsilon_0 = 0,513 \text{ meV}$ ($k'^2 = 0,7$)

"1,0" : calcul avec $\epsilon_0 = 0,734 \text{ meV}$ ($k'^2 = 1,0$)

"1,3" : calcul avec $\epsilon_0 = 0,954 \text{ meV}$ ($k'^2 = 1,3$)

Au § III.4.1 nous exposons comment sont obtenues les valeurs de la mobilité $\mu_{b.c}$ des électrons dans la bande de conduction pour les trois échantillons aux températures où la conduction "hopping" devient de plus en plus grande. La fig. III.13 présente les variations de $\mu_{b.c}$ en fonction de la température ; on a porté de plus la courbe $\mu(T)$ calculée pour une énergie de tronquage $\epsilon_0 = 0,734$ meV qui apparaît représenter le mieux les variations de $\mu_{b.c}$ en fonction de T, en particulier dans le cas de l'échantillon n°2 pour lequel l'incertitude sur les valeurs de $\mu_{b.c}$ est la plus faible. Sans aller jusqu'à justifier pleinement le modèle de tronquage choisi et la valeur de ϵ_0 , le bon accord entre μ et $\mu_{b.c}$ traduit bien le fait que l'approximation de BORN ne peut s'appliquer aux électrons de faible vitesse.

III-2-2- Variations du facteur de diffusion r_H

Pour les électrons libres, dans la bande de conduction, la procédure d'analyse numérique précédemment exposée conduit aux valeurs calculées du facteur de diffusion r_H en utilisant les mécanismes de dispersion les plus efficaces aux basses températures. La figure III.1 montre que la diffusion par les impuretés ionisées seule entraîne une rapide variation du facteur de diffusion vers 10K pour atteindre aux plus hautes températures, des valeurs d'autant plus importantes que le matériau est moins dopé : à 35K, il atteint 1,71 pour l'échantillon n°3, 1,56 pour le n°2 et 1,48 pour le n°1. Le temps de relaxation correspondant à la diffusion par les impuretés neutres étant indépendant de l'énergie des porteurs incidents (relation I.3.26), le facteur de diffusion correspondant est toujours égal à 1. Ainsi le facteur de diffusion global r_H est d'autant plus faible que la dispersion par les impuretés neutres est plus efficace. Les variations de r_H sont données pour les trois échantillons sur la figure III.7 où sont également présentées les courbes du facteur de diffusion ne considérant que la dispersion par les impuretés ionisées.

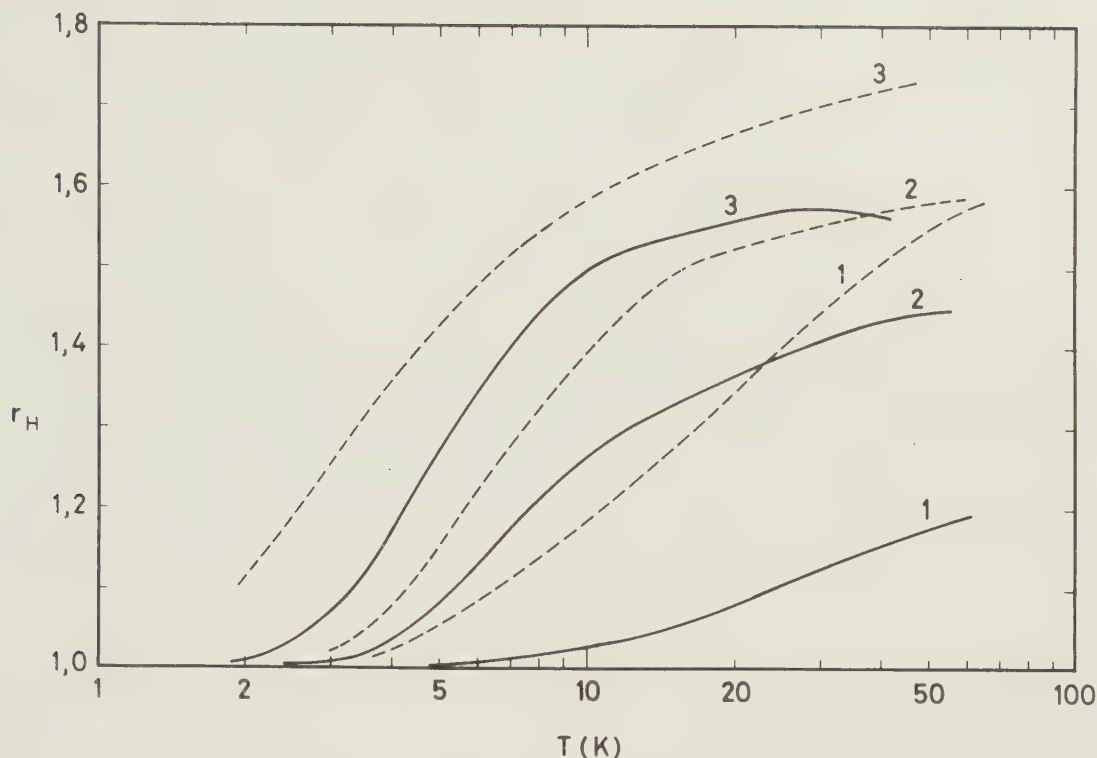


FIG. III.7 Variations calculées du facteur de diffusion r_H compte tenu de l'ensemble des interactions (trait plein). On a reporté en trait pointillé le facteur de diffusion déterminé uniquement à partir de la formule de BROOKS-HERRING.

A plus haute température, l'influence des diffusions par le potentiel de déformation et par les modes piézoélectriques (pour lesquels les facteurs de diffusion valent respectivement 1,177 et 1,105 à 60K) affaiblit progressivement r_H lorsque la température croît. Etant donné les valeurs de r_H très différentes de 1 et ses variations importantes avec la température, il apparaît qu'une analyse dans laquelle le facteur de diffusion est pris égal à 1 doit conduire à une erreur appréciable sur les caractéristiques d'un échantillon et ceci d'autant plus qu'il se trouve faiblement dopé.

La correction utilisée pour tenir compte des interactions électron-électron ne fait pas intervenir, de par la manière dont elle a été traduite, de variation du facteur de diffusion r_H . Cette simplification se trouve

probablement moins bien vérifiée lorsque la concentration électronique est importante, ceci pouvant être une explication du moins bon accord des valeurs calculées avec les résultats expérimentaux pour l'échantillon n°1 (cf § III.1.2)

Lorsque l'approximation de BORN n'est plus justifiée à priori aux basses températures, la correction que nous avons introduite et qui fait intervenir une énergie de tronquage ϵ_0 , diminue la valeur du facteur de diffusion r_H . Sur la figure III.8 qui représente l'effet de cette correction sur le facteur de diffusion calculée uniquement à partir de la dispersion par les impuretés ionisées, on remarque que le facteur de diffusion décroît rapidement lorsque l'énergie de tronquage ϵ_0 (ou k'^2) augmente : un plus grand nombre d'électrons libres ont alors un temps de relaxation constant, donc sont sans contribution au facteur de diffusion.

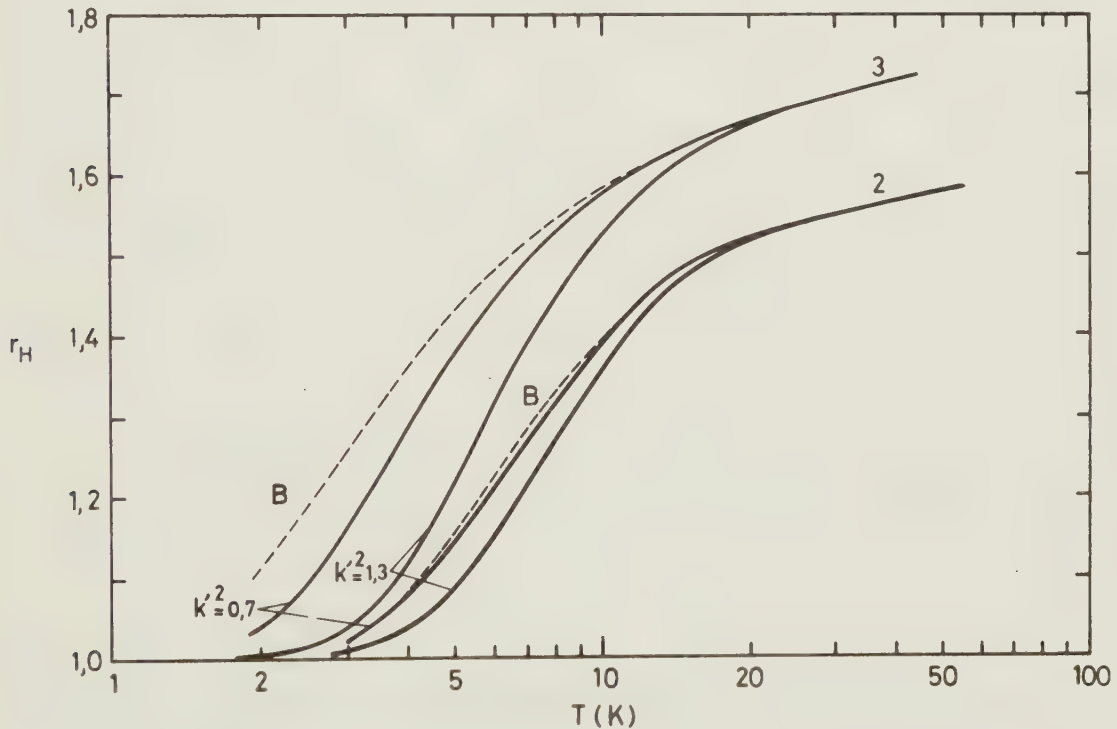


FIG. III.8 Influence de l'énergie de tronquage ϵ_0 sur le facteur de diffusion dû uniquement à la dispersion par les impuretés ionisées (cas des échantillons n°2 et n°3)
 "B" calcul dans l'approximation de BORN (formule de BROOKS-HERRING)
 $k'^2 = 0,7$ et $k'^2 = 1,3$ correspondent respectivement aux valeurs d'énergie de tronquage $\epsilon_0 = 0,513$ meV et $\epsilon_0 = 0,954$ meV.

Par ailleurs, il est possible d'obtenir une estimation de r_H aux températures élevées (supérieures à 77K) en utilisant la relation III.1.5, $\frac{n(T)}{n_H(T)} = r_H(T)$ dans laquelle $n(T)$ est la valeur de la concentration en électrons libres calculée à partir de l'équation de neutralité (relation I.2.11) avec N_D , N_A et ϵ_D et où $n_H(T)$ est la valeur expérimentale. La figure III.9 illustre les variations obtenues : on observe une rapide décroissance de r_H après une valeur maximum se situant à 30K avec $r_H = 1,57$ pour l'échantillon n°3 et à 38K avec $r_H = 1,38$ pour le n°2. Les variations de r_H sont ensuite sensiblement constantes et égales pour les deux échantillons de 90K à 300K. La valeur de r_H ainsi calculée est de 1,18 pour le n°2 et de 1,20 pour le n°3 à la température ambiante.

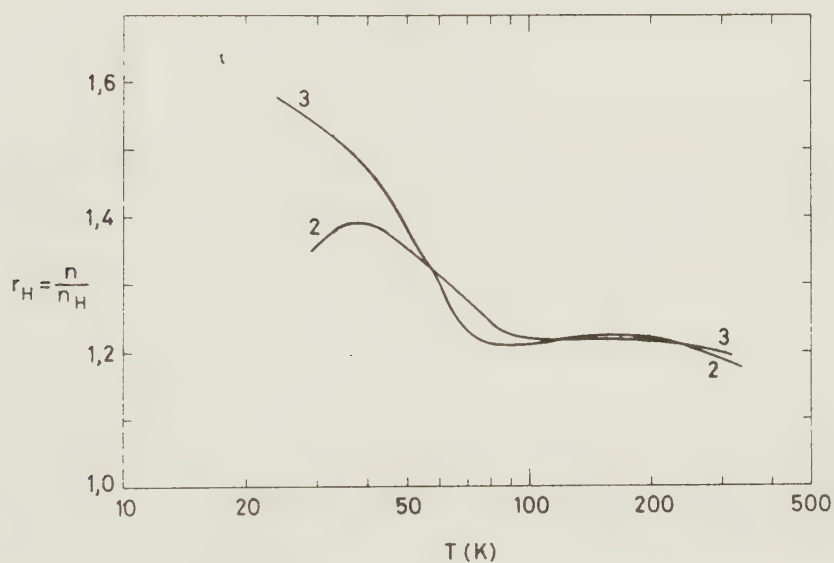


FIG. III.9 Variations du facteur de diffusion r_H déterminées par le rapport $\frac{n}{n_H}$ dans le cas des échantillons n°2 et n°3.

Il faut cependant considérer prudemment ces résultats : le calcul de $n(T)$ est réalisé à partir de l'équation de neutralité (relation I.2.11) dans laquelle ϵ_D et m^* sont considérées comme des constantes en fonction de T . Or, cela se trouve très justifié pour une gamme de températures peu élevées (pour $T < 77K$) mais la variation de m^* en particulier au-dessus de 100K, représentée sur la figure I.4 peut avoir une incidence importante sur la valeur de r_H ainsi déterminée. Une autre source d'imprécision provient de la méthode d'analyse elle-même : celle-ci considère la différence $N_D - N_A$ comme un paramètre qui est ajustable dans de faibles proportions ($\pm 10\%$) ; ces écarts se retrouvent notamment sur la valeur de r_H calculée à la température ambiante. Malgré les réserves faites, les valeurs de r_H obtenues ici ainsi que leurs variations sont assez voisines de celles déduites à partir de l'étude de la conduction dans GaAs en fonction du champ magnétique (63).

III - 3 - DOMAINE DE CONDUCTION "HOPPING"

Dans le domaine des très basses températures, les trois couches épitaxiées présentent une variation linéaire de $\lg \rho$ en fonction de T^{-1} . Ce comportement caractéristique d'une conduction de type "hopping" existe pour $T < 2,5K$ pour l'échantillon n°1, pour $T < 2,2K$ pour le n°2 et pour $T < 3,9K$ pour le n°3 (cf. fig. II.9). Nous allons étudier ce type de conduction en utilisant les valeurs des concentrations en impuretés données au paragraphe III.1.3.

III-3-1- Dépendance du terme ρ_3 avec la concentration N_D

Dans l'expression I.4.1 donnant la résistivité due à la conduction "hopping" seule qui s'écrit :

$$\rho(T) = \rho_3 \cdot \exp\left(\frac{\epsilon_3}{k_B T}\right)$$

le terme ρ_3 dépend de la concentration en atomes donneurs N_D par la relation (I.4.9) :

$$\rho_3 = \rho_0 \cdot \exp\left(\frac{1,78}{a_0 \cdot N_D^{1/3}}\right)$$

Celle-ci n'est toutefois valable que pour des semi-conducteurs peu dopés, c'est-à-dire lorsque $(N_D^{1/3} \cdot a_o^*)^{-1} \gg 1$. Sur la figure III.10 sont reportées $\lg \rho_3$ en fonction du facteur $(N_D^{1/3} \cdot a_o^*)$ pour les trois échantillons présentés : les valeurs correspondant aux travaux de EMEL'YANENKO et coll. (52) sur GaAs sont également indiquées ainsi que la droite de pente 1,78 passant par l'ordonnée $\lg \rho_o \approx -3$ (estimation donnée par SHKLOVSKII (49)). Un bon agrément des résultats est obtenu pour les couches épitaxiées les plus dopées (n°1 et n°2) alors que la valeur correspondant à l'échantillon n°3 s'écarte légèrement de la droite tracée. Deux raisons peuvent être données concernant la différence entre la courbe théorique et la valeur de ρ_3 correspondant à l'échantillon n°3 :

- l'équation définissant le terme ρ_3 ne s'applique correctement que lorsque le degré de compensation $K = \frac{N_A}{N_D}$ n'est pas très important (74), or $K = 0,78$ pour la couche épitaxiée n°3, ce qui correspond à un degré de compensation déjà appréciable.

- étant donné la valeur élevée de ρ_3 pour cet échantillon ($\rho_3 = 0,5 \cdot 10^4 \Omega \cdot \text{cm}$), l'existence possible de zones de résistivité légèrement plus faible, soit au niveau de l'interface avec le substrat soit à la surface de la couche épitaxiée, peut conduire à une valeur mesurée de ρ_3 inférieure à celle correspondant à la "masse" de l'échantillon.

Ainsi, comme SHKLOVSKII (49) le suggère, il est possible d'obtenir une estimation rapide de N_D et N_A pour un échantillon semi-conducteur à partir du terme ρ_3 (quand il existe une conduction "hopping") qui donne N_D et en mesurant la concentration en porteurs $n = N_D - N_A$ à une température où l'échantillon est en régime extrinsèque (centres totalement ionisés) ; la précision est d'autant plus grande que ρ_3 est inférieur à $10^3 \Omega \cdot \text{cm}$.

Le tableau III.2 regroupe les valeurs obtenues pour les trois couches analysées.

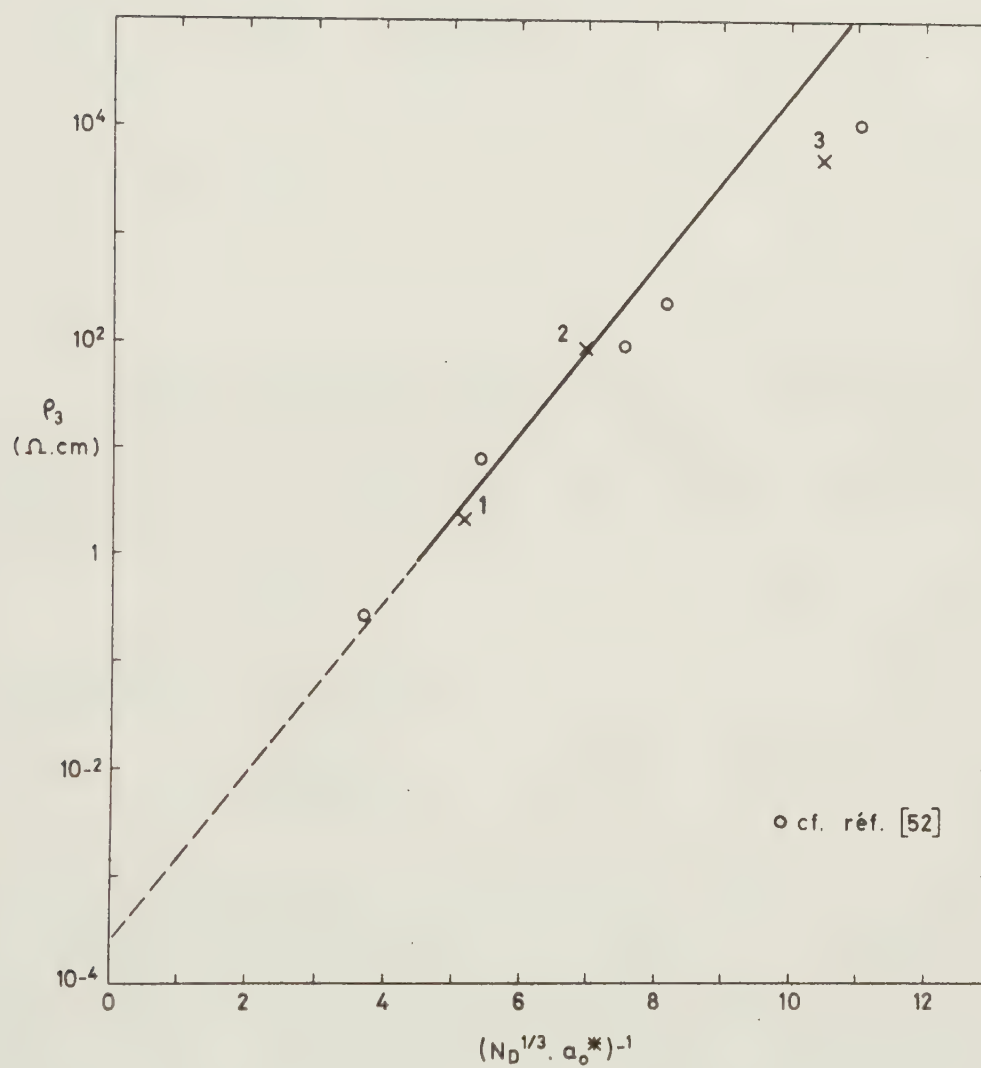


FIG. III.10 Variations du terme ρ_3 en fonction de $(N_D^{1/3} \cdot a_o^*)^{-1}$. Les cercles concernent les travaux effectués par EMEL'YANENKO et coll. [52], les croix représentent nos échantillons.

Référence échantillons	n°	ρ_3 $\Omega.cm$	ϵ_3 meV	$(N_D^{1/3} a_o^*)^{-1}$	ρ_o calculé $\Omega.cm$
GAE 555	1	2,16	0,101	5,10	$2,57.10^4$
GAE 586	2	83,9	0,384	6,93	$3,69.10^4$
GAE 577	3	$4,98.10^3$	0,452	10,40	$4,08.10^5$

TABLEAU III.2

III-3-2- Dépendance du terme ρ_3 avec le champ magnétique

L'étude théorique réalisée par SHKLOVSKII (49) (cf. § I.4.2) ne s'applique que pour des champs magnétiques modérément élevés tels que la "longueur magnétique" λ_H définie par :

$$\lambda_H^2 = \frac{c \cdot \hbar}{e \cdot H} \quad (III.3.1)$$

vérifie la condition suivante :

$$\lambda_H > \frac{a_o^*}{(N_D \cdot a_o^{*3})^{1/6}} \quad (III.3.2)$$

Dans ce cas, la relation (I.4.11) montre que le terme $\lg \rho_3$ croît linéairement avec H^2 : nous avons reporté sur la figure III.11 les résultats expérimentaux concernant les échantillons n°2 et n°3. L'échantillon n°1 n'a pas été reporté car le champ magnétique correspondant à la condition III.3.2 ($H > 13$ Koersteds) est voisin de la limite des possibilités expérimentales. Les valeurs expérimentales se trouvent en bon accord avec cette description : les segments en pointillé des droites passant par l'origine indiquent les zones où le champ magnétique est trop faible pour répondre au critère donné par l'expression (III.2.2).

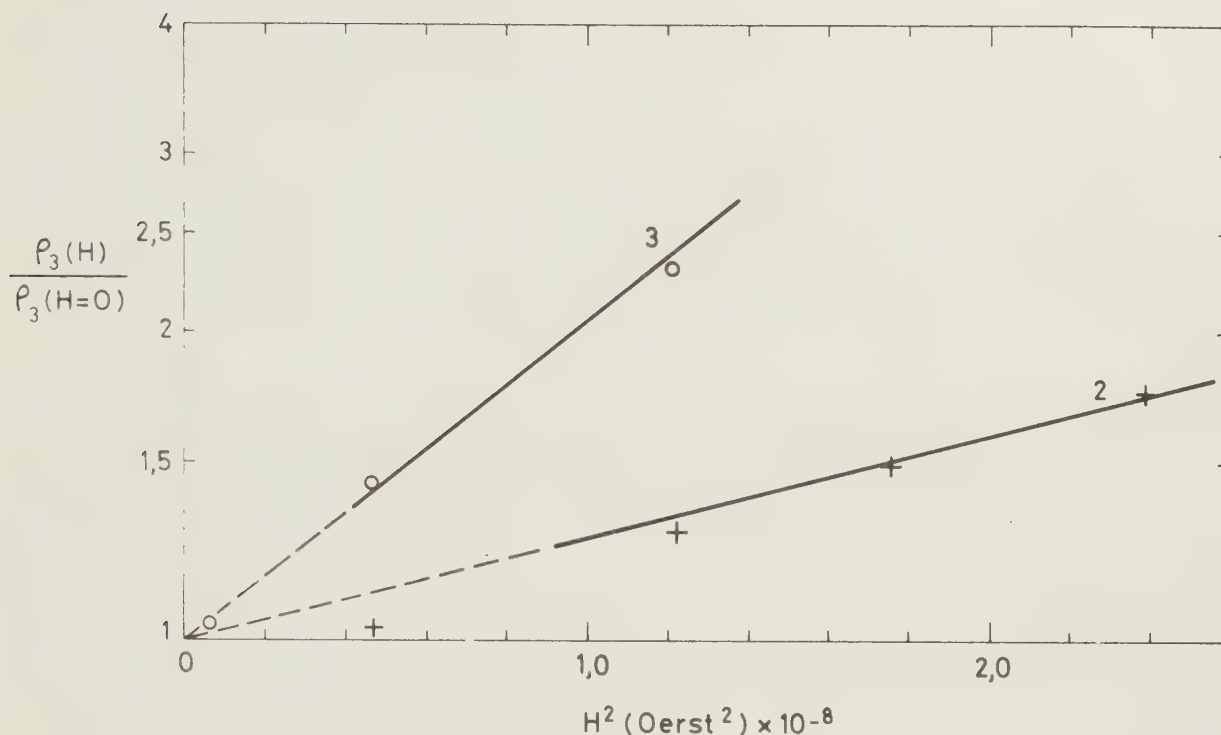


FIG. III.11 Variations du rapport $\frac{\rho_3(H)}{\rho_3(H=0)}$ en fonction de H^2 . (Cas des échantillons n°2 et n°3).

Les valeurs limites de H en dessous desquelles le modèle ne s'applique plus sont respectivement de 9,5 KOerst pour l'échantillon n°2 et 6,3KOerst pour l'échantillon n°3.

Par ailleurs, le coefficient numérique t de la relation (I.4.11) estimé à 0,04 par la théorie de la percolation, est trouvé avoir une valeur comprise entre 0,026 et 0,032 à partir de nos mesures. Le tableau III.3 présente les différents résultats pour ces échantillons : les trois dernières colonnes donnent respectivement le rapport $\rho_3(H)/\rho_3(H=0)$ obtenu expérimentalement, le coefficient numérique t que l'on en déduit et aussi le rapport $\rho_3(H)/\rho_3(H=0)$ calculé en supposant $t = 0,04$ (valeur fournie par la théorie de la percolation), on observe ainsi sur l'ensemble des résultats un bon accord entre résultats expérimentaux et calculés.

Réf. échantillons	n°	H K. Oerst	$\rho_3(H)$ $\Omega.cm$	$\epsilon_3(H)$ meV	$\rho_3(H)/\rho_3(H=0)$ exp	t exp	$\rho_3(H)/\rho_3(H=0)$ calculé avec t=0,04
GAE 585	2	0	83,9	0,384	1		
		6,6	86,5	0,381	1,030	0,0092	1,141
		11,0	108,2	0,389	1,289	0,0276	1,444
		13,2	125,4	0,405	1,494	0,0363	1,697
		15,4	147,9	0,428	1,762	0,0414	2,014
GAE 577	3	0	4980	0,452	1		
		2,2	5200	0,446	1,043	0,0333	1,012
		6,6	7140	0,442	1,432	0,0315	1,177
		11,0	11500	0,468	2,307	0,0264	3,539

TABLEAU III.3

III-3-3- Dépendance de ϵ_3 avec la concentration N_D

Deux relations (I.4.14) et (I.4.15) permettent, en fonction du degré de compensation du matériau, de déterminer l'énergie d'activation de la conduction "hopping". Dans le cas de l'échantillon n°1, la valeur $K = 0,193$ conduit à l'utilisation de l'expression (I.4.14) valable pour les faibles compensations qui donne $\epsilon_3 = 1,79$ meV, résultat présentant une grande différence avec la valeur $\epsilon_3 = 0,102$ meV obtenue à partir de $\rho(T)$ (cf. tableau II.1). SHKLOVSKII (49) a signalé le même désaccord dans le cas du germanium dont le degré de compensation n'est pas très faible et la concentration N_D supérieure à $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Il suggère que l'augmentation de la densité N_A de centres accepteurs crée une plus grande dispersion en énergie des niveaux

donneurs. La conduction "hopping" se fait ainsi principalement à travers les niveaux de plus faible énergie, alors que le calcul prend en compte une moyenne de la distribution énergétiques des niveaux donneurs.

Les deux autres échantillons présentent des degrés de compensation élevés et égaux à 0,623 et 0,785 ; leur énergie d'activation est donc définie par la relation (I.4.15) qui conduit à des valeurs du facteur ν égales respectivement à $\nu=0,197$ pour l'échantillon n°2 et 0,246 pour l'échantillon n°3. En l'absence d'autres résultats fournis par la littérature, il paraît très difficile d'apporter une conclusion définitive, la relative concordance entre les deux résultats concernant le coefficient indiquent cependant que la description proposée par SHKLOVSKII et EFROS (47) est une bonne approche.

L'utilisation de la théorie de la percolation par les auteurs cités ci-dessus traduit de manière assez satisfaisante l'ensemble des résultats expérimentaux. Cependant ces résultats sont en nombre encore trop restreint pour justifier pleinement cette description.

III - 4 - RESULTATS RELATIFS AU DOMAINE DE CONDUCTION "MIXTE"

III-4-1- Estimation de la mobilité de conduction des électrons libres

Dans une gamme de températures intermédiaires, de l'ordre de 4K à 10K mais dépendant des échantillons, les deux processus de conduction par électrons libres et par "hopping" ont des importances relatives du même ordre de grandeur et la conductivité totale est la somme des deux conductivités. La résistivité totale du matériau ρ s'écrit alors :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho_{bc}} + \frac{1}{\rho_{hop}} \quad (\text{III.4.1})$$

en appelant : ρ_{bc} , la contribution à la résistivité due aux électrons libres.

ρ_{hop} , la contribution à la résistivité due au mécanisme "hopping".

Si l'on considère que la loi donnant la résistivité de type "hopping" et qui s'écrit (cf. relation I.4.1) :

$$\rho_{\text{hop}} = \rho_3 \cdot \exp \left(\frac{\epsilon_3}{k_B T} \right)$$

est encore valable lorsque les deux mécanismes interviennent (cette hypothèse doit être vérifiée tant que la densité de centres donneurs neutres n'est pas sensiblement modifiée avec la température) nous pouvons déduire de la relation III.4.1 la valeur de ρ_{bc} connaissant d'une part la résistivité totale expérimentale et d'autre part en utilisant les valeurs de ρ_3 et de ϵ_3 obtenues à partir des mesures de résistivité aux basses températures (cf. fig. III.12). Remarquons tout de suite que l'incertitude sur la valeur de ρ_{bc} ainsi évaluée augmente lorsque la contribution "hopping" est de plus en plus importante. En outre, dans le cas de l'échantillon n°3, le domaine "mixte" est étroit et la conduction passe rapidement d'un type à l'autre quand la température décroît, ce qui limite également la précision sur la valeur de ρ_{bc} obtenue.

Les résultats de l'analyse du § III.1 ont permis le calcul, en fonction de la température, de la concentration en électrons libres n qui se trouve représentée sur la figure III.4. Ainsi il est possible d'accéder à l'estimation de la mobilité de conduction (notée μ_{bc}) aux basses températures par la relation :

$$\mu_{bc} = \frac{1}{n \cdot e \cdot \rho_{bc}} \quad (\text{III.4.2})$$

Nous avons représenté sur la figure III.13 les variations calculées de μ et les valeurs de μ_{bc} . Pour l'échantillon n°2, les valeurs obtenues de μ_{bc} sont en bon accord avec la courbe de la mobilité calculée dans la zone de température où la précision sur μ_{bc} est encore suffisante. Ceci confirme que les divers mécanismes de diffusion pris en compte pour l'analyse numérique décrivent bien les interactions des électrons libres dans le matériau aux basses températures. Dans le cas de l'échantillon n°3, l'incertitude sur la valeur de ρ_{bc} entraîne une dispersion des points représentatifs de μ_{bc} qui encadrent cependant la courbe calculée $\mu(T)$. Par contre la différence

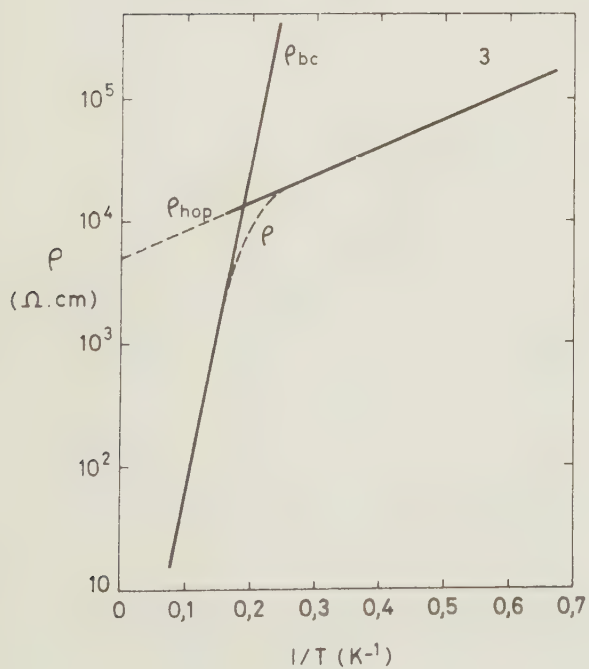
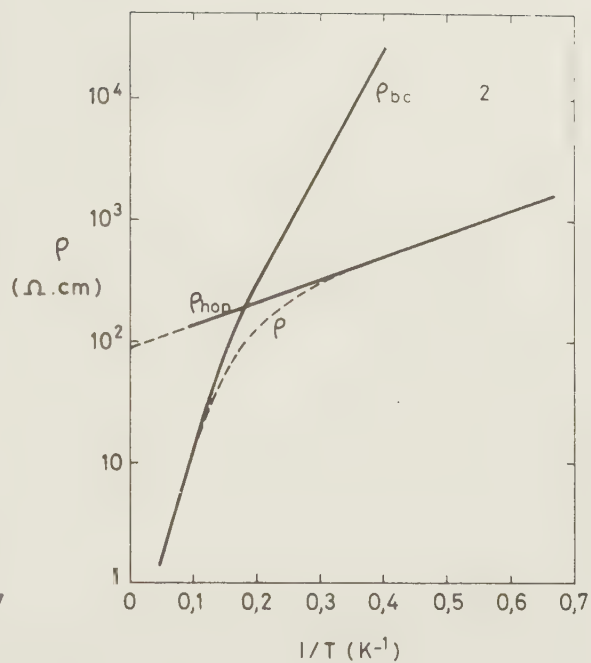
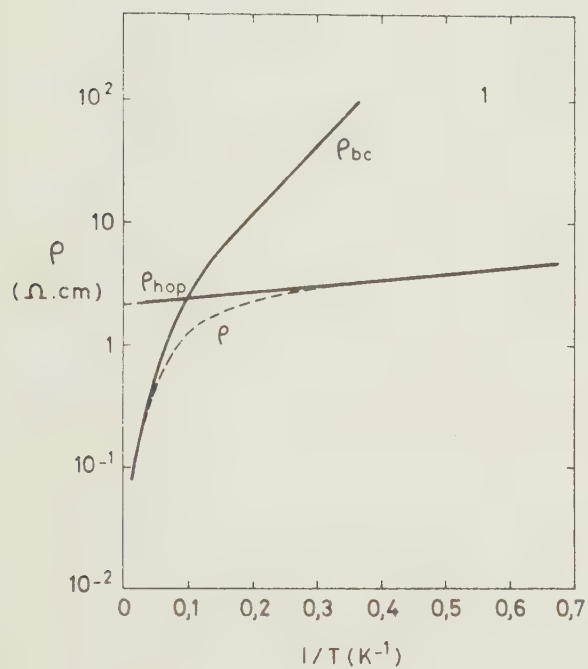


FIG. III.12 Variations avec la température des composantes ρ_{bc} et ρ_{hop} de la résistivité expérimentale ρ dans le cas des trois échantillons.

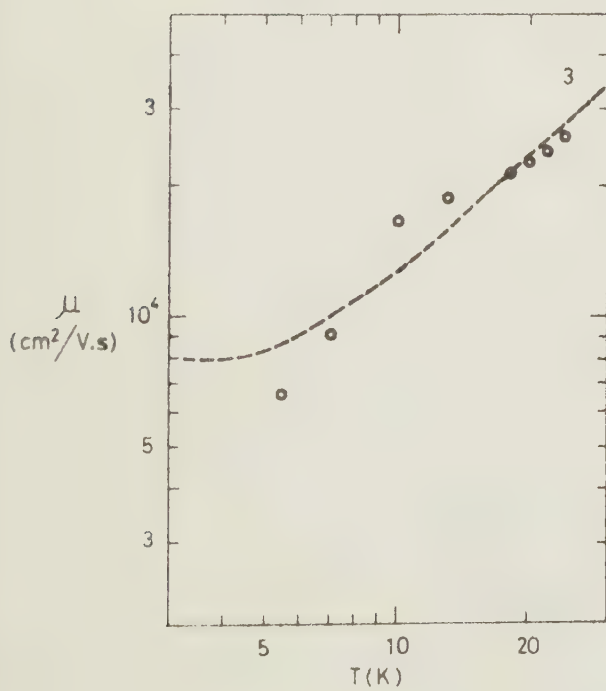
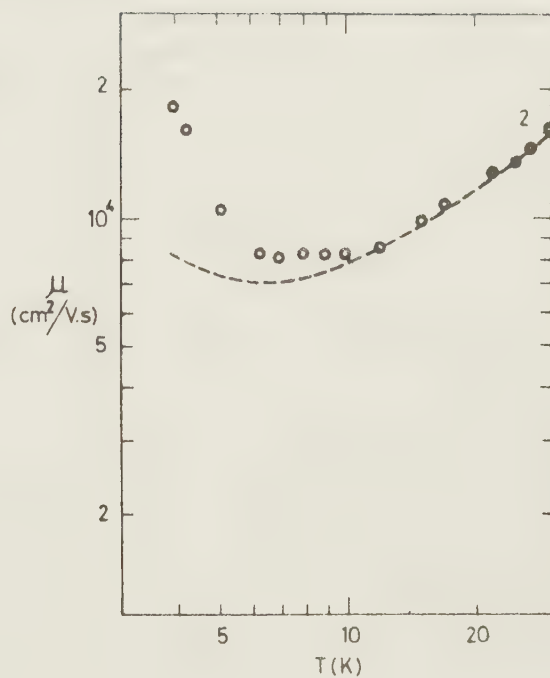
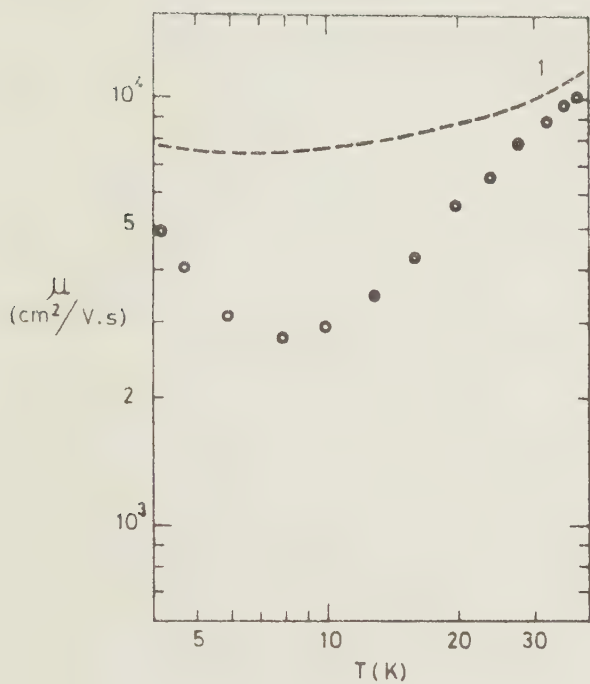


FIG. III.13 Variations avec la température de la mobilité de conduction calculée μ (trait pointillé) et de μ_{bc} (cercles) dans le cas des trois échantillons.

entre les valeurs calculées et expérimentales est grande pour l'échantillon n°1, différence pour lequel il n'y a pas d'explication immédiate. Il faut rappeler que la caractérisation de cet échantillon est moins précise alors qu'elle intervient dans les calculs de μ et de $\mu_{b.c}$ par l'intermédiaire du terme n , ce qui peut entraîner un écart notable entre ces deux déterminations sans toutefois expliquer totalement la différence observée.

III-4-2- Tentative d'analyse utilisant une description à deux types de porteurs

Différents auteurs, tels que OLIVER (75) et BASINSKI et OLIVIER (76) ont déjà utilisé ce type de description pour analyser les résultats expérimentaux concernant la conduction aux basses températures. D'une façon générale, en repérant deux ensembles de porteurs ayant un comportement différent sous l'action d'une force électrique appliquée par les indices 1 et 2, la contribution globale au coefficient de HALL R_H est donnée par (76) :

$$R_H = \frac{1}{e} \left[\frac{r_1 n_1 \mu_1^2 + r_2 n_2 \mu_2^2}{(n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2)^2} \right] \quad (\text{III.4.3})$$

où : r_i représente un facteur de diffusion de l'ensemble de porteurs noté i
 n_i est la concentration en porteurs de l'ensemble i
 μ_i est la mobilité de conduction des porteurs de l'ensemble i .

Utilisant à priori cette description pour représenter la contribution des deux processus de conduction par électrons libres dans la bande de conduction (notation b.c) et par mécanisme "hopping" (notation hop), il vient :

$$R_H = \frac{\frac{1}{e} \left[r_{bc} \cdot n_{bc} \cdot \mu_{bc}^2 + \frac{r_{hop} \cdot \mu_{hop}}{e \cdot \rho_{hop}} \right]}{\frac{1}{e^2} \cdot \left[\frac{1}{\rho_{bc}} + \frac{1}{\rho_{hop}} \right]^2}$$

soit encore :

$$R_H = e \rho^2 \cdot \left[r_{bc} \cdot n_{bc} \cdot \mu_{bc}^2 + \frac{r_{hop} \cdot \mu_{hop}}{e \cdot \rho_{hop}} \right] \quad (\text{III.4.4})$$

Cette relation peut rapidement s'exprimer en fonction de la mobilité expérimentale μ_H , donnée que nous avons utilisée au cours de cette étude ; à partir de $\mu_H = \frac{R_H}{\rho}$ nous obtenons ;

$$\mu_H = e \cdot \rho \left[r_{bc} \cdot n_{bc} \cdot \mu_{bc}^2 + \frac{r_{hop} \cdot \mu_{hop}}{e \cdot \rho_{hop}} \right] \quad (III.4.5)$$

Les valeurs déterminées pour μ_{bc} étant entâchées d'une relative imprécision comme nous l'avons déjà signalé, nous avons préféré utiliser les valeurs de la mobilité calculée notée μ . On a choisi pour valeurs du facteur de diffusion $r_{b.c}$ celles données par le calcul numérique et précédemment noté r_H . Il reste cependant, à ce stade, une question qui est de savoir si le mécanisme "hopping" donne une contribution à l'effet Hall.

MOTT et TWOSE (45) ainsi que d'autres auteurs ont suggéré que le mécanisme "hopping" ne devait apporter qu'une contribution nulle au négligeable au coefficient de HALL. Par contre SKAL et SHKLOVSKII (51), HOLCOMB et REHR (77) ainsi que d'autres, à partir d'une description filamentaire, ont établi que le mécanisme "hopping" pourrait donner une contribution à l'effet Hall et en ont même déduit une relation liant la densité de centres participant à la conduction "hopping" au coefficient de Hall.

Si l'on se place dans la première hypothèse il faut rendre $\mu_{hop} = 0$ dans la relation III.4.5 pour traduire l'inefficacité du "hopping" vis-à-vis de l'effet Hall. La formule III.4.5 se réduit à $\mu_H = e \rho r_H n \mu^2$, et les valeurs ainsi calculées de la mobilité sont beaucoup plus grandes que les valeurs expérimentales : par exemple pour l'échantillon n°2 les valeurs calculées sont de 60% supérieures aux valeurs expérimentales à 9K. Considérer que le mécanisme "hopping" n'apporte aucune contribution à l'effet Hall ne permet pas d'expliquer les résultats expérimentaux. Il faut donc se placer dans la seconde hypothèse qui conduit à estimer la contribution à l'effet Hall du mécanisme "hopping" à partir de la relation III.4.5 où tous les autres paramètres ont été déterminés à partir des résultats expérimentaux du domaine de conduction par électrons libres. Nous avons représenté sur la figure III.14 les variations de $\mu_{H(hop)} = \frac{r_{hop} \cdot \mu_{hop}}{e \cdot \rho_{hop}}$ pour les échantillons n°2 et 3 : on constate que $\mu_{H(hop)}$ décroît rapidement lorsque

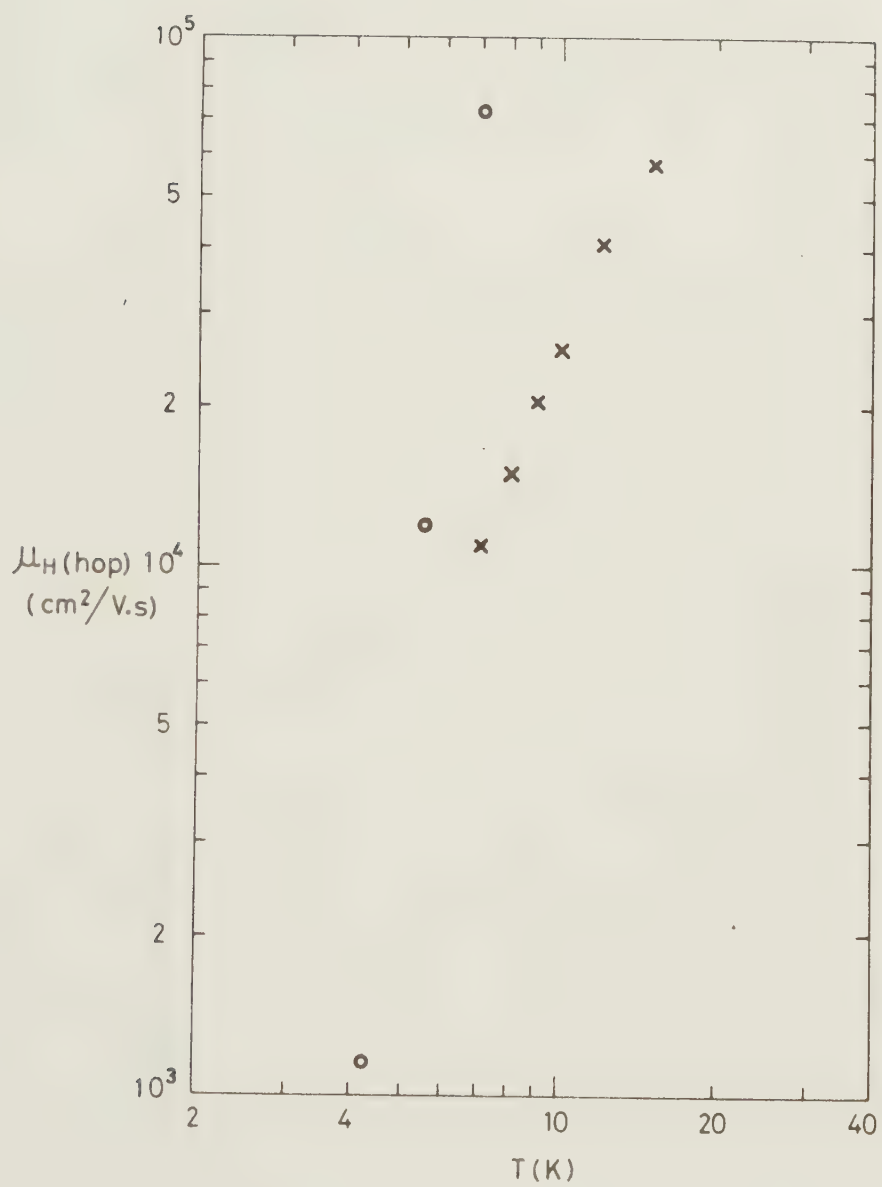


FIG. III.14 Variations avec la température du terme $\mu_H(hop)$ calculée dans le cas de l'échantillon n°2 (croix) et n°3 (cercles).

la température diminue. Pour l'échantillon n°1, la grande différence entre les valeurs de μ et de μ_{bc} déjà signalée n'a pas permis de donner de résultats significatifs concernant ce domaine de conduction "mixte".

Le calcul de $\mu_{H(hop)}$ donne pour les deux échantillons une valeur négative, ce qui correspond à une conduction de type lacunaire. Il est alors possible de calculer le terme n_{hop} qui représenterait la densité de centres participant au "hopping" ; prenant $r_{hop} = 1$, on obtient :

$$n_{hop} = \frac{1}{e \cdot \rho_{hop} \cdot \mu_{H(hop)}} \quad (III.4.6)$$

Les variations obtenues sont représentées sur la figure III.15 pour les échantillons n°2 et n°3, où on voit que la concentration n_{hop} augmente lorsque la température décroît.

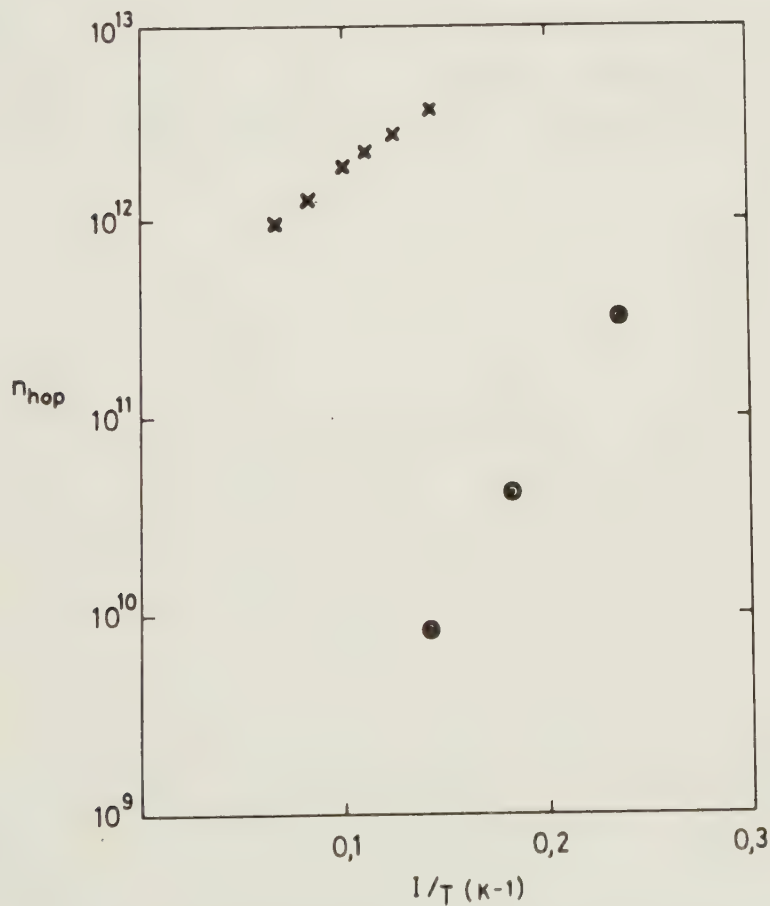


FIG. III.15 Variations avec la température de la concentration calculée n_{hop} pour les échantillons (représentation du n°2 par les croix et du n°3 par les cercles).

Cette analyse du domaine de conduction mixte qui considère deux ensembles de porteurs n'a de sens que si l'on a affaire à un échantillon homogène ; elle conduit à attribuer une contribution à l'effet Hall de l'ensemble des électrons responsables de la conduction "hopping". Cependant les seules explications, à l'heure actuelle, de l'existence d'un effet Hall dans le cas du "hopping" font intervenir une conduction filamenteuse dans l'échantillon. Si cette description est correcte il est évident que l'analyse précédente ne peut être qu'une approche grossière de la réalité. De plus, dès l'instant où l'on considère que le dopage dans le cristal est inhomogène, il faut en tirer toutes les conséquences. Ainsi les variations spatiales de dopage entraînent des variations spatiales de concentration en électrons libres, conséquence de celles de l'énergie du minimum de la bande de conduction ; les effets en sont d'autant plus marqués que la concentration moyenne en électrons libres est faible ce qui est le cas dans le domaine de conduction mixte ($n \sim 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ à 5K pour l'échantillon n°3). Les mesures de conduction dans le domaine mixte ne sont pas suffisantes pour préciser la nature et la part exacte des mécanismes de conduction possibles.

CONCLUSION

Nous avons présenté dans ce mémoire les résultats expérimentaux concernant la conduction aux basses températures (inférieures à 70K) dans GaAs de type n et discuté de leur interprétation. Deux types de conduction existent dans ce domaine de températures : celui dû aux électrons libres dans la bande de conduction et celui dû au mécanisme "hopping" (conduction par saut).

Pour décrire la conduction due aux électrons libres nous nous sommes particulièrement attachés à prendre en compte avec le maximum de précision tous les mécanismes de dispersion efficaces aux basses températures. De plus, plutôt que de prendre le facteur de diffusion des électrons r_H égal à 1, nous l'avons calculé en fonction de la température T pour chacun des échantillons étudiés. C'est cette valeur calculée de r_H qui, ayant été introduite dans une méthode d'exploitation originale exposée au § III.1, traduit le mieux les résultats expérimentaux dans le domaine de températures où le courant est dû uniquement au transport des électrons libres sous l'action du champ électrique. Alors que r_H prend des valeurs voisines de 1,2 à 300K comme l'indiquent également d'autres travaux, celles-ci augmentent lorsque T décroît et r_H atteint un maximum dépassant 1,5 pour les échantillons les plus purs dans le domaine où la dispersion sur les centres ionisés est prépondérante. Ceci montre qu'une analyse simplifiée où r_H est pris égal à 1 conduit à une caractérisation des échantillons (N_D , N_A) entachée d'une forte erreur. Nous pensons avoir obtenu pour notre part une détermination des dopages en impuretés de type donneur (N_D) et accepteur (N_A) plus précise.

Munis de ces valeurs pour chaque échantillon, il a été possible de confronter les résultats expérimentaux concernant la conduction "hopping" aux descriptions théoriques actuelles dans le domaine où la contribution des électrons libres est négligeable. Bien que l'accord que nous avons

obtenu apparaisse satisfaisant, il serait encore nécessaire de le confirmer par d'autres mesures sur des échantillons aussi bien caractérisés car il n'y a pas assez de résultats suffisamment précis connus à l'heure actuelle.

L'examen du domaine où les contributions des deux types de conduction précitées sont du même ordre de grandeur a été fait à partir des hypothèses proposées dans la littérature. Les résultats obtenus n'apparaissent pas satisfaisants ce qui n'est point étonnant car on décrit un échantillon avec des relations établies pour un système homogène ce qui n'est certainement plus le cas dans ce domaine de conduction mixte.

Il serait intéressant de faire un modèle qui traduise réellement l'inhomogénéité de l'échantillon avec ses conséquences dans le domaine de conduction mixte et d'en examiner les résultats quand N_D et N_A varient. La comparaison avec des données expérimentales pourra être faite sérieusement dès l'instant où l'on sait déterminer avec précision les dopages en impuretés des échantillons de GaAs.

BIBLIOGRAPHIE

- (1) HILSUM C. Progress in Semicond. Vol 9, Chap. 4 (1965).
- (2) HERMAN F. J. Electronics 1, 103 (1955).
- (3) CALLAWAY J. J. Electronics 2, 330 (1957).
- (4) EHRENREICH H. Phys. Rev. 120, 6, 1951 (1960).
- (5) EHRENREICH H. J. of Applied Physics 32, 10, 2155 (1961).
- (6) STEVENS E.H. and YEE S.S. J. of Applied Physics 44, 2, 715 (1973).
- (7) STILLMAN G.E., WOLFE C.M., and DIMMOCK J.O. Solid State Communications 7, 921 (1969).
- (8) STRADLING R.A. and WOOD T.A. J. of Physics C, Solid State Physics 3, 5, L94 (1970).
- (9) HERLACH F. J. Phys. C Solid State Phys. 7, L308 (1974).
- (10) BOLGER D.E., FRANKS J., GORDON J. and WHITAKER J. Symp. on GaAs, paper 3, pg 16 (1966).
- (11) EDDOLLS D.V. Phys. Stat. Sol. 17, 67 (1966).
- (12) STILLMAN G.E., WOLFE C.M. and DIMMOCK J.O. Symp. on GaAs, paper 25, pg 212 (1970).
- (13) DEBYE P.P. and CONWELL E.M. Phys. Rev. 93, 693 (1954).
- (14) LEE T.F. and Mac GILL T.C., J. of Applied Physics, 46, 1, 373 (1975).
- (15) BALTENSPERGER W., Phil. Mag. 44, 1355 (1955).
- (16) BLAKEMORE J.S., Semiconductor Statistics, Pergamon Press, chap 3 (1962).
- (17) BLATT F.J. Physics of Elect. Cond. in Solids, Mc Graw Hill, chap 5 (1968).
- (18) HAUG A. Theoretical Solid State Physics, Pergamon Press, vol 2, chap 4 (1972).
- (19) HOWARTH D.J. and SONDHEIMER E.H. Proc. Roy. Soc. A 219, 53 (1953).
- (20) BARDEEN J. and SHOCKLEY W. - Phys. Rev. 80, 1, 72 (1950).
- (21) SHOCKLEY W. and BARDEEN J. - Phys. Rev. 77, 407 (1950).
- (22) CONWELL E.M., Solid State Physics, Sup. 9, Chap 3 (1967).
- (23) SHOCKLEY W., Electrons and Holes in Semicond., Van Nostrand Co, chap 11 (1950).
- (24) MEIJER H.J.G. and POLDER D., Physica, 19, 255 (1953).
- (25) ZOOK J.D., Phys. Rev. 136, 3A, 869 (1964).
- (26) EHRENREICH H., J. Phys. Chem. Solids 8, 130 (1959).
- (27) WOLFE C.M., STILLMANN G.E. and LINDLEY W.T., J. of Applied Physics 41, 7, 3088 (1970).

- (28) CONWELL E.M. and WEISSKOPF V.F., Phys. Rev. 77, 3, 388 (1950).
- (29) BROOKS H. Adv. Elect. Elect. Phys. 7, 158 (1955).
- (30) BLATT F.J., J. Phys. Chem. Solids 1, 262 (1957).
- (31) SCHIFF L.I., Quantum Mechanics, Mac GRAW-HILL, chap. 7 (1949).
- (32) DINGLE R.B., Phil. Mag., 46, 831 (1955).
- (33) ERGINSOY C., Phys. Rev. 79, 1013 (1950).
- (34) SAMOILOCICH A.G. and NITSOVICH M.V. Soviet Physics-Solid State 5, 10, 2182 (1964).
- (35) CALLAWAY J. and CUMMINGS F.W. Phys. Rev. 126, 1, 5 (1962).
- (36) Mc WHORTER A.L. and REDIKER R.H. Proceedings of Ther Int. Conference on Semicond. Physics-Prague, pg 134 (1961).
- (37) APPEL J., Phys. Rev. 122, 6, 1760 (1961).
- (38) APPEL J., Phys. Rev. 125, 6, 1815 (1962).
- (39) LUONG M. and SHAW A.W. Phys. Rev. B, 4, 8, 2436 (1971).
- (40) SHKLOVSKII B.I. and EFROS A.L. Soviet Phys. JETP, 34, 2, 435 (1972).
- (41) CONWELL E.M., Phys. Rev. 103, 1, 51 (1956).
- (42) MOTT N.F., Canadian Journal of Physics, 34, 1356 (1956).
- (43) MILLER A. and ABRAHAMS E., Phys. Rev. 120, 3, 745 (1960).
- (44) TOYABE T. and ASAI S., Phys. Rev. B, 8, 4, 1531 (1973).
- (45) MOTT N.F. and TWOSE W.D., Adv. Phys. 10, 107 (1961).
- (46) SHKLOVSKII B.I. and EFROS A.L., Soviet Physics JETP, 33, 2, 468 (1971).
- (47) EFROS A.L., SHKLOVSKII B.I. and YANCHEV I.Y. Phys. Stat. Sol.(b) 50, 45 (1972).
- (48) AMBEGAOKAR V., HALPERIN B.I. and LANGER J.S., Phys. Rev. B, 4, 8, 2612 (1971).
- (49) SHKLOVSKII B.I. Soviet Phys. Semicond. 6, 7, 1053 (1973).
- (50) SKAL A.D. and SHKLOVSKII B.I. Soviet Phys. Semicond, 7, 8, 1058 (1974).
- (51) SKAL A.S. and SHKLOVSKII B.I. Soviet Phys. Semicond, 8, 8, 1029 (1975).
- (52) EMEL'YANENKO O.V., LAGUNOVA T.S., NASLEDOV D.N., NEDEOGLO D.D. and TIMCHENKO I.N. Soviet Phys. Semicond., 7, 10, 1280 (1974).
- (53) ZALLEN R. and SCHER H. Phys. Rev. B, 4, 12, 4471 (1971).
- (54) MOTT N.F. Phil. Mag. 19, 839 (1969).
- (55) CALLEN H.B. Phys. Rev. 76, 1394 (1969).
- (56) GERSHENZON E.M., IL'IN V.A. and LITVAK-GORSKAYA L.B. Soviet Phys. Semicond. 8, 2, 189 (1974).
- (57) BEER A.C., Galvanomagnetic Effets in Semiconductors, Acad. Press, chap 5 (1963).

- {58} WOLFE C.M., STILLMAN G.E. and DIMMOCK J.O. J. of Applied Phys. 41, 2, 504 (1970).
- {59} Gallium Arsenide Symposium Proceedings - Dallas - Chap. 1 (1968).
- {60} VAN DER PAUW L.J. Philips Res. Rep. 13, 1 (1958).
- {61} AIRAPETYANTS S.V. and TARASOV V.D. Soviet Phys. Semicond. 7, 1, 150 (1973).
- {62} Réf {57}, §9.
- {63} STILLMAN G.E., WOLFE C.M. and DIMMOCK J.O. J. Phys. Chem. Solids. 31, 1199 (1970).
- {64} ASAI S., TOYABE T. and HIRAO M.. Proc. Int. Conf. Semicond. pg 578 (1970).
- {65} VALIEV K.A., GRITCHENKO V.N. and PASHINTSEV Y.I. Soviet Phys. Semicond. 7, 3, 357 (1973).
- {66} EDWARDS W.D., HARTMANN W.A. and TORRENS A.B. Solid State Electronics 15, 387 (1972).
- {67} HEIME K., KONIG U., KOHN E. and WORTMANN A. Solid State Electronics 17, 835 (1974).
- {68} ROBINSON G.Y. Solid State Electronics. 18, 331 (1975).
- {69} KRAVCHENKO A.F., MOROZOV B.V. and SKOK E.M. Soviet Phys. Semicond. 6, 11, 1831 (1973).
- {70} WHITAKER J. and BOLGER D.E. Solid State Communications 4, 181 (1966).
- {71} HARRIS J.S. and SNYDER W.L. Solid State Electronics, 12, 337 (1969).
- {72} WOLFE C.M., FOYT A.G. and LINDLEY W.T., Electrochemical Technol. 6, 208 (1968).
- {73} JOHNSON F.A. and COCHRAN W. Proc. Int. Conf. Phys. Semicond., Exeter, pg 498 (1962).
- {74} GADZHIEV A.R. and SHLIMAK I.S. Soviet Phys. Semicond. 8, 1, 120 (1974).
- {75} OLIVER D.J. Phys. Rev. 127, 4, 1045 (1962).
- {76} BASINSKI J. and OLIVIER R. Canadian Journal of Physics 45, 119 (1967).
- {77} HOLCOMB D.F. and REHR J.J. Phys. Rev. 183, 3, 773 (1969).

VU :

Le Président de la Thèse

J. MEINNEL

VU :

Le Directeur de Thèse

R. GRANGER

VU ET APPROUVE

RENNES, le

Le Directeur de l'U.E.R.

VU ET PERMIS D'IMPRIMER

RENNES, le

Le Président de l'Université de RENNES

C. CHAMPAUD

